

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**

**ХАРКІВСЬКА НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ  
МІСЬКОГО ГОСПОДАРСТВА**

До друку дозволяю  
Перший проректор

Г.В.Стадник

**В.О. Бараннік**

**НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК  
ДО ВИВЧЕННЯ ДИСЦИПЛІНИ “МОДЕЛЮВАННЯ І  
ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ”**

**(для студентів денної і заочної форм навчання  
спеціальності 6.070800 - „Екологія та охорона  
навколишнього середовища”  
напряму 0708 „Екологія”)**



Харків-ХНАМГ-2007

Навчальний посібник до вивчення дисципліни  
“Моделювання і прогнозування стану довкілля” (для  
студентів денної і заочної форм навчання спеціальності  
6.070800 - „Екологія та охорона навколишнього  
середовища” напряму 0708 - „Екологія”).

Авт. Бараннік В.О. – Харків: ХНАМГ, 2007. – 85 с.

Автор: к.ф.-м.н., с.н.с., В.О. Бараннік

Рецензенти: доц., к.т.н. В.М. Ладиженський,  
ст. викл. Ю.І. Вергелес

Рекомендовано Вченою радою ХНАМГ як навчальний  
посібник для студентів екологічної спеціальності,  
протокол № 9 від 25 травня 2007 р.

© В. О. Бараннік, 2007

Учися , серденько, колись  
З нас будуть люде...  
*Т. Г. Шевченко “Доля”*

**НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК  
ДО ВИВЧЕННЯ ДИСЦИПЛІНИ “МОДЕЛЮВАННЯ І  
ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ”  
(для студентів денної і заочної форм навчання  
спеціальності 6.070800 - „Екологія та охорона  
навколишнього середовища”  
напряму 0708 „Екологія”)**

## **ВСТУП**

Мета цього посібника – викласти основи створення математичних моделей, у яких найбільше має потребу інженерна екологія, якщо ціллю дослідження є моделювання і прогнозування стану природних або штучних екосистем для отримання нових знань щодо їх можливих властивостей.

Давно минули часи, коли екологія обмежувалася якісними або досить простими кількісними описами спостережень. Саме застосування сучасного математичного апарату моделювання в екологічних дослідженнях виправдовує прикметних “інженерна” у назві досить молодого наукового та інженерного напрямку досліджень і розробок, що має назву “інженерна екологія”.

Відбір матеріалу досить важкий: посібник, що вміщує усі методи, які застосовуються у різних задачах інженерної екології, був би надзвичайно великим. Тому ми звичайно включали моделі та методи, що мають найбільше застосування на практиці, і навели посилання на інші посібники; проте ми не завжди керувалися цим правилом у всіх випадках.

Звичайно, найкращий шлях зробити будь-яке ствердження достатньо обґрунтованим – це надати йому строгий доказ. Проте, нам вважається, що багато студентів, зацікавлених головним чином у прикладних аспектах, досить важко сприймають абстрактні докази і моделі не через відсутність здібностей, але тому, що цікавість у них виникає лише тоді, коли їм зрозумілі практичні можливості. Саме для цього зміст посібника ілюстровано практичними задачами.

Цей посібник можна вивчати послідовно, але деякі його розділи є досить незалежними від інших; таким чином можна і навіть корисно вивчати окремі розділи паралельно. Звичайно, вважається, що читач вже знайомий з курсом математичного аналізу в обсязі програми вищого технічного учбового закладу.

## 1. МІСЦЕ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ В СИСТЕМНОМУ АНАЛІЗІ ДОВКІЛЛЯ

Ми знаємо, що інтелектуальна  
страва інколи засвоюється краще,  
якщо приймати її у не надмірно  
концентрованому виді.

*F. Cajori “ History of Mathematical Notations”*

### 1.1. Ознаки системи, характеристика та види систем

Свідомість людини наділена обмеженою спроможністю сприймати всесвіт у всьому різноманітті його явищ і зв'язків, саме тому умовний розподіл його на системи забезпечує можливість аналізу процесів, що відбуваються у ньому взагалі і, зокрема, у навколишньому середовищі, що оточує людину. Звичайно *під системою розуміють сукупність одного або декількох елементів середовища, що взаємодіють між собою та з довкіллям, від якого система відокремлюється фізичними або умовними границями.*

Взаємодія елементів системи між собою та з довкіллям відбувається за рахунок *силової дії, обміну речовинами, енергією або інформацією.*

Інженерна екологія найбільшу увагу приділяє обміну речовинами або енергією. Відповідно до цього з певною мірою абстрагування дійсності розрізняють закриті й відкриті та проточні й непроточні системи. *Закритою системою* називають сукупність, якщо можна знехтувати взаємодією її елементів з довкіллям без втрати її суттєвих властивостей, що підлягають аналізу (наприклад, чай та повітря у закритому термосі на протязі нетривіального часу). У протилежному випадку систему називають *відкритою*. Відкриті системи поділяють на проточні та непроточні. До *непроточних* відносять відкриту систему, якщо можна знехтувати її обміном речовинами із довкіллям (наприклад, продукти та повітря у закритому холодильнику). У протилежному випадку систему відносять до *проточних систем*.

*Характеристиками системи* є фізичні величини, що визначають вміст речовин і енергії в елементах системи та потоки речовин і енергії між елементами системи та між

системою і довкіллям. Фізичні величини вмісту та потоків речовин і енергії у системі та між системою і довкіллям називають *змінними системами*. Сукупність змінних, що визначають потоки речовин або енергії від довкілля до системи, називають *входами системи*. Сукупність змінних, що визначають потоки речовин або енергії від системи у довкілля, називають *виходами системи*. *Параметрами* називають фізичні величини, що визначають властивості потоків речовин або енергії між елементами системи та між системою і довкіллям. Частина параметрів певної системи, що мають незмінні величини, називають її *коефіцієнтами*, а коефіцієнти, що мають універсальну величину для усіх або багатьох систем (наприклад, маса атома водня, число Авогадро, прискорення сили тяжіння на рівні земної поверхні, тощо), визначають як *константи*.

Класифікацію простих систем за ознаками, що мають суттєве значення відповідно до цілей їх дослідження, можна проводити з використанням наступних альтернатив: “детермінованість – випадковість”, “зосередженість – розподіленість”, “статичність – динамічність”, “непреривність – дискретність”, “лінійність – нелінійність”.

Так, якщо впливом випадкових факторів на входи, виходи і в самій системі можна знехтувати, так що існує однозначна залежність виходів від входів, то її відносять до *детермінованих систем*. У протилежному випадку систему розглядають як *ймовірнісну* або *стохастичну*.

Якщо неоднорідністю розподілу вмісту речовин та енергії в системі можна знехтувати, то систему розглядають як *зосереджену*, і в протилежному випадку - як *розподілену*.

Якщо усі змінні системи можна вважати постійними у часі, то система є *статичною*. Система є *динамічною*, якщо деякі змінні змінюються у часі.

Якщо всі змінні системи можна вважати неперервними функціями часу, то систему розглядають як *неперервну*. У протилежному випадку її відносять до *дискретних* систем.

Нарешті, якщо з достатньою для цілей дослідження точністю виходи системи можна визначити як лінійні комбінації її входів (суперпозиція впливів), то систему розглядають як *лінійну*. Навпаки, коли деякі входи підсилюють

або послаблюють вплив інших входів на систему, то її відносять до **нелінійних** систем.

Слід пам'ятати, що реальні об'єкти завжди поєднують у собі альтернативні властивості, тому віднесення системи до певного виду є абстрагуванням, доцільність якого обумовлюється метою дослідження та вимогами її спрощення без втрати бажаної точності результатів аналізу. Ситуація ще більше ускладнюється, якщо деякими елементами складної системи є інші системи. Тоді система верхнього рівня ієрархії може поєднувати альтернативні властивості об'єктів у будь-якому сполученні.

#### Контрольні запитання до підрозділу 1.1.

- 1) Що називають системою?
- 2) На які види розділяють системи?
- 3) Що називають відкритою системою?
- 4) Що називають закритою системою?
- 5) Які ознаки проточної системи?
- 6) Які ознаки непроточної системи?
- 7) Що є характеристиками системи?
- 8) Які характеристики системи називають її входами?
- 9) Які характеристики системи називають її виходами?
- 10) Які альтернативи визначають властивості простих систем?
- 11) Чим відрізняються коефіцієнти від констант?
- 12) Чим відрізняються детерміновані та стохастичні системи?
- 13) Що відрізняє статичну та динамічну системи?
- 14) Як розрізнити неперервну та дискретну системи?
- 15) Чи завжди можна характеризувати систему за певною альтернативою?

#### Контрольні завдання до підрозділу 1.1.

- 1) Наведіть приклади систем довкілля.
- 2) Наведіть приклади відкритих систем довкілля
- 3) Наведіть приклади проточних систем довкілля.

Мораль тут така: піклуйся про глузд,  
а звуки піклуватимуться за себе самі.  
Льюїс Керолл “Аліса у країні чудес”

#### 1.2. Місце моделювання в системному аналізі довкілля

У широкому розумінні **системний аналіз** – це дисципліна, що займається проблемами прийняття рішень в умовах, коли вибір альтернативи потребує аналізу складної інформації різної фізичної природи. Більш конкретно, отже й звужено, системний аналіз визначається як **методологія дослідження об'єктів на основі зображення їх у вигляді систем і аналізу цих систем методами логічного, математичного або натурального моделювання, що є ефективним засобом розв'язання складних, недостатньо чітко сформульованих завдань.**

Як синтетична прикладна наука, що поєднує підходи, методи та результати досліджень інших дисциплін у діапазоні від точних наук до психології, соціології тощо, системний аналіз склався й отримав стрімкий розвиток після другої світової війни. Практикою доведено, що проблеми та системи довкілля у повній мірі відповідають умовам застосування системного аналізу.

**Основними етапами системного підходу** до аналізу й вирішенню проблем довкілля є:

- Визначення границь та елементів системи, в межах якої існує проблема, а також екологічних, економічних і соціальних критеріїв оцінки її проявів або наслідків.
- Збір інформації щодо елементів системи, визначення її структури, причинно-наслідкових зв'язків та побудова концептуальної моделі (блок-схеми) системи.
- Встановлення змінних системи та побудова її математичної моделі, що визначає зв'язок виходів системи з її входами.
- Визначення можливих варіантів впливу на входи системи та вибір найдоцільнішого через моделювання та порівняння виходів системи за встановленими критеріями.

Широке застосування математичних моделей у системному аналізі проблем взаємодії суспільства і природи

обумовлене, з одного боку, швидким зростанням використання і можливостей обчислювальної техніки, порівняно низькою вартістю розробки моделей та достатньо високою точністю розрахунків, а з другого – дуже обмеженими можливостями лабораторного або натурного моделювання складних процесів і систем навколишнього середовища. У той же час саме дані спостережень і експериментів складають підґрунтя математичного моделювання, без якого воно залишається відірваним від дійсності.

Процес складання та уточнення математичної моделі системи починається вже з першого етапу системного аналізу і формально завершується на третьому етапі, де уявлення щодо причинно-наслідкових зв'язків системи перетворюються у сукупність математичних складових моделі, що мають вигляд тотожностей, рівнянь, нерівностей тощо. Цей процес нагадує побудову бажаної моделі певної конструкції з елементів конструктора. Ця аналогія досить глибока, тому що сучасне комерційне програмне забезпечення складних інженерних розрахунків містить майже повний набір необхідних елементів математичного аналізу, засобів їх поєднання у математичні моделі систем, пошуку рішень, аналізу і відображення результатів моделювання та наділене такими дружніми інтерфейсами, що надають математичному моделюванню ігрових ознак.

### Контрольні запитання до підрозділу 1.2.

- 1) Що називають системним аналізом?
- 2) З яких етапів робіт складається системний підхід?
- 3) Для чого в системному аналізі використовуються математичні моделі?
- 4) Чому математичні моделі надбали широкого застосування у системному аналізі довкілля?
- 5) Що полегшує використання математичних моделей у системному аналізі довкілля?

### Контрольні завдання до підрозділу 1.2.

- 1) Назвіть відомі вам екологічні проблеми довкілля.
- 2) Назвіть відомі вам програмні засоби моделювання.
- 3) Назвіть відомі вам технічні засоби моделювання.

Дедка за репку, бабка за дедку,  
внучка за бабку, жучка за внучку...  
*Сказка "Репка"*

### 1.3. Основні стадії побудови та види математичних моделей

Математична модель – це уявляема або матеріальна система, що відображає або імітує об'єкт дослідження та здатна замішувати його таким чином, що її вивчення дозволяє отримати нову інформацію.

Процес побудови математичної моделі системи навколишнього середовища включає повністю або часткову наступні стадії.

- Прийняття рішення щодо необхідності розробки математичної моделі.
- Визначення мети моделювання.
- Опис системи, що моделюється: визначення її елементів, границь, довкілля, взаємодії елементів.
- Розгляд та обґрунтування припущень щодо можливого спрощення системи, що моделюється.
- Визначення змінних системи, її входів, виходів, параметрів.
- Формулювання моделі у вигляді блок-схеми змінних системи та їх зв'язків, рівнянь, початкових та граничних обмежень (умов) тощо.
- Перетворення моделі у стандартну математичну форму.
- Підготовка моделі до реалізації на обчислюваному пристрої.
- Налаштування моделі за даними спостережень.
- Перевірка адекватності моделі за даними спостережень.
- Практичне застосування моделі.

Слід особливо підкреслити, що процес розробки математичної моделі – це, як правило, ітеративна процедура із зворотними зв'язками, позначеними пунктирними стрілками, послідовного наближення до бажаного опису моделюваного об'єкта. Рішення щодо достатнього для цілей моделювання відтворення реакцій виходів системи на зміну її входів приймаються на стадіях налаштування та перевірки адекватності

моделі.

**Стадія настройки** моделі необхідна тому, що навіть при використанні у побудові моделі фундаментальних принципів і теорій, вихід моделі може суттєво відрізнятись від реакції об'єкта внаслідок прийнятих припущень і спрощень. Ці відхилення можуть бути певною мірою мінімізовані. Для цього дані натурних спостережень використовують як **“навчальну” вибірку**. Моделювання процесів (прогонка моделі) для умов спостереження за різними величинами її вільних (обраних для підбору) параметрів і коефіцієнтів виконується до тих пір, доки вихід моделі не буде відповідати навчальній вибірці найліпшим чином. Якщо ця відповідність задовольняє встановлені вимоги до адекватності моделі, то стадія настройки моделі вважається успішною. Якщо ні, то слід переглянути припущення і спрощення, що приймалися на попередніх стадіях. Якщо у процедурі настройки моделі підбирають декілька параметрів, то доцільно перед цим провести **аналіз чутливості** виходів моделі до зміни цих величин. Це дозволяє зосередити зусилля на підборі величин тих параметрів, які найбільшим чином впливають на виходи моделі.

**Стадія перевірки адекватності (точності)** моделі доцільна з такої причини. Навіть якщо настройка моделі пройшла з успіхом, пристосованість моделі до імітації реакцій об'єкта за іншими зовнішніми впливами залишається під питанням. **Неформальна перевірка** точності моделі виконується за допомогою розрахунків та порівняння результатів за модельними ситуаціями, що допускають аналітичні рішення. Підвищити степінь упевненості щодо адекватності моделі дозволяє процедура її **формальної перевірки**. Для цього необхідно мати **перевірочну вибірку** спостережень об'єкта за умов, що відрізняються від умов спостережень, які були використані як навчальна вибірка. Якщо відміна перевірочних результатів моделювання від даних спостережень достатньо мала, а саме, відповідає встановленим вимогам до адекватності моделі, то перевірка моделі визнається успішною. У протилежному випадку слід знову повернутися до перегляду попередніх стадій розробки моделі з метою її удосконалення.

Класифікація математичних моделей може відбуватися за ознаками систем, що моделюються. Так математичні моделі

простих за структурою систем також можуть визначатися як:

- детерміновані або ймовірнісні (стохастичні) моделі;
- моделі з зосередженими або розподіленими параметрами;
- статичні або динамічні моделі;
- дискретні або неперервні моделі;
- лінійні або нелінійні моделі.

Математичні моделі можуть мати вигляд функцій, рекурентних залежностей, окремих алгебричних рівнянь та їх систем, окремих та систем звичайних диференціальних рівнянь, окремих та систем диференціальних рівнянь у частинних похідних тощо.

### Контрольні запитання до підрозділу 1.3.

- 1) Які стадії реалізують у повному обсязі процес побудови математичної моделі системи довкілля?
- 2) Чому необхідна стадія настройки моделі?
- 3) Як виконується настройка моделі?
- 4) Яку мету має перевірка адекватності моделі?
- 5) Як виконується перевірка адекватності моделі?
- 6) Які стадії розробки моделі можуть переглядатися, щоб підвищити її адекватності?
- 7) Як класифікують математичні моделі?
- 8) Який вигляд можуть набувати математичні моделі?

### Контрольні завдання до підрозділу 1.2.

- 1) Наведіть приклади відомих Вам матеріальних моделей.
- 2) Наведіть приклади відомих Вам математичних моделей.
- 3) Визначіть види, до яких можна віднести математичні моделі, що описують рух штучних супутників Землі.
- 4) Визначіть види, до яких можна віднести математичні моделі, що описують можливі результати розіграшу лотереї.
- 5) Визначіть види, до яких можна віднести математичні моделі, що описують геометричні параметри нерухомих предметів.

## 2. ПОБУДОВА ДЕТЕРМІНОВАНИХ МОДЕЛЕЙ СИСТЕМ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА

До якої міри можна вилучати користь, спеціалізую позначення для того, щоб вони засвоювалися більш просто?

*F. Cajori "History of Mathematical Notations"*

### 2.1. Кількісні показники вмісту, обміну та трансформації речовин в системах

Фундаментальні принципи, закони, теорії є надзвичайно важливою складовою сучасних математичних моделей систем навколишнього середовища. Якщо зміна стану системи пов'язується головним чином з обміном речовинами, то її кількісними характеристиками є вміст речовин у елементах системи і потоки речовин між елементами системи та між елементами системи і довкіллям, що керуються певними законами.

В залежності від агрегатного стану елемента системи (тверде тіло, рідина, газ або суміш фаз) вміст  $C$  речовини в ньому може вимірюватися її концентрацією, молярною концентрацією, об'ємною, масовою, або молярною частками. Надалі будемо приймати масову частку для визначення вмісту речовини в елементі, якщо не буде спеціальних застережень. Відповідно до цього маса  $m$  певної речовини в елементі системи вимірюється добутком

$$m = C \cdot M, \quad (2.1)$$

де  $M$  є маса елемента. Швидкість зміни маси речовини в елементі вимірюється похідною

$$\dot{m} \equiv \frac{dm}{dt} = M \frac{dC}{dt} + C \frac{dM}{dt} \equiv M \dot{C} + C \dot{M}, \quad (2.2)$$

де  $t$  є час.

Потік  $j$  речовини до елемента через його границі або поверхню вимірюється масою речовини, що надходить до елемента за одиницю часу. Цей потік може бути додатнім, від'ємним або нульовим.

Крім того, речовина в елементі може перетворюватися в інші речовини через реактивні процеси. Швидкість  $r^{(-)}$  реактивного перетворення речовини в елементі вимірюється її масою, що трансформується у інші речовини за одиницю часу. З другого боку, речовина через реакції може утворюватися в елементі з інших речовин. Швидкість  $r^{(+)}$  реактивного утворення речовини в елементі також вимірюється її масою, що народжується в елементі з інших речовин за одиницю часу.

#### Контрольні запитання до підрозділу 2.1.

- 1) Які процеси можуть призводити до зміни вмісту речовини в елементі, що є відкритою системою?
- 2) Які процеси можуть призводити до зміни вмісту речовини в елементі, що є закритою системою?
- 3) Які процеси можуть призводити до зміни вмісту речовини в елементі, що є проточною системою?
- 4) Які процеси можуть призводити до зміни вмісту речовини в елементі, що є непроточною системою?

#### Контрольні завдання до підрозділу 2.1.

- 1) Вміст певної речовини в елементі системи змінюється з часом  $t$  за законом  $C(t) = \exp(-kt)$ . Визначіть швидкість зміни вмісту речовини в елементі.
- 2) За умов попереднього завдання визначіть швидкість зміни сумарного вмісту маси інших речовин, що складають разом з певною речовиною цілий елемент.
- 3) Вміст певної речовини в елементі системи змінюється з часом  $t$  за законом  $C(t) = \frac{1}{(1+kt)^n}$ . Визначіть швидкість зміни вмісту речовини в елементі.
- 4) Вміст певної речовини в елементі системи змінюється з часом  $t$  за законом  $C(t) = 1/(1+kt^n)$ . Визначіть швидкість зміни вмісту речовини в елементі.
- 5) За умов попередніх завдань визначити час зменшення вмісту речовини в елементі удвічі від початкового  $C(t=0)$ .

А і Б сиділи на трубі.  
 А впало, Б пропало.  
 Що zostалося на трубі?  
*Жартівлива загадка*

## 2.1. Принцип матеріального балансу

Принцип матеріального балансу є наслідком фундаментального **закону збереження маси речовини**, згідно до якого маса речовини не виникає з нічого і не зникає без сліда, але тільки переміщується у просторі, перетворюється у інші речовини або утворюється з інших речовин. Математичним виразом принципу матеріального балансу певної речовини в елементі системи є рівняння

$$\dot{m} \equiv \frac{dm}{dt} = j + r^{(+)} - r^{(-)}, \quad (2.3)$$

де  $m$  є маса речовини в елементі

Якщо мірою величини елемента системи є його маса  $M$ , тобто маса усіх речовин, що його складають, то матеріальний баланс для елемента в цілому відображується рівнянням

$$\begin{aligned} \dot{M} &\equiv \frac{dM}{dt} = J; \\ J &= \sum j, \end{aligned} \quad (2.4)$$

де  $J$  є сумарний (повний) потік маси усіх речовин до елемента системи, що також може бути додатнім, від'ємним або нульовим. Реакції, що протікають у елементі, не впливають на його повну масу.

З рівнянь (2.2), (2.3) і (2.4) виводиться рівняння відносно вмісту (масової частки) певної речовини в елементі системи

$$\begin{aligned} \dot{C} &= j^{(n)} - J^{(n)}C + r^{(n+)} - r^{(n-)}, \quad (2.5) \\ j^{(n)} &= \frac{j}{M}; \\ J^{(n)} &= \frac{J}{M}; \end{aligned}$$

$$r^{(n+)} = \frac{r^{(+)}}{M}; \quad r^{(n-)} = \frac{r^{(-)}}{M},$$

де верхніми індексами  $(n)$ ,  $(n+)$  і  $(n-)$  позначені питомий (на одиницю маси елемента) потік певної речовини крізь границі елемента і питомі швидкості реакцій утворення та перетворення речовини, що відбуваються в елементі системи.

Залежність швидкості реакцій у системі від вмісту речовин у елементах системи встановлюється відповідно до закону діючих мас.

### Контрольні запитання до підрозділу 2.1.

- 1) Як формулюється закон збереження маси речовини?
- 2) Чому реакції утворення та перетворення речовин у елементі не впливають на його масу?
- 3) Що називаємо питомими потоками речовин, що впливають на масу елемента?
- 4) Що називаємо питомими швидкостями реакцій, що відбуваються у елементі системи?

### Контрольні завдання до підрозділу 2.1.

- 1) Спробуйте вивести рівняння (2.5) виходячи з рівнянь (2.2 – 2.4).
- 2) Визначіть вміст (масову частку) речовини у пробі води об'ємом 1 літр, якщо проба містить 5,5 г речовини.
- 3) Поясніть, що відбувається з масою елемента системи, якщо потік  $J$  є додатнім.
- 4) Поясніть, що відбувається з масою елемента системи, якщо потік  $J$  є від'ємним.
- 5) Поясніть, що відбувається з масою елемента системи, якщо потік  $J$  дорівнює нулю.
- 6) Маса елемента системи  $M = 3,7$  кг. Розрахувати

швидкість  $\dot{C}$  зміни вмісту певної речовини у елементі, якщо  $J = 0$ ;  $j = 3,7$  мг/с;  $r^{(+)} = 6,8$  мг/с;  $r^{(-)} = 9,2$  мг/с.



Додати сік лимону, цукор або мед і натерти лимонну цедру.  
Т.М. Банщикова "Безалкогольні напої"

## 2.2. Закон діючих мас

Відповідно до закону діючих мас, якщо реакції речовин протікають у розчинах, газових або дрібнодисперсних сумішах і елемент системи є саме таким композитом, то питомі швидкості реакцій утворення або перетворення речовин у елементі залежать лише від вмісту в ньому реагуючих речовин (реагентів)

і фізичних умов (температура  $t^o$ , тиск  $p$ ,  $pH$ , освітленість, інтенсивність змішування тощо). Якщо обмежитися урахуванням найбільш поширених бінарних реакцій, що протікають через взаємодію пар реагентів, то закон діючих мас дозволяє представити питомі швидкості реакцій у вигляді суми питомих швидкостей бінарних реакцій, а саме:

$$r_i^{(n+)} = \sum r_{i,k+l \rightarrow i}^{(n+)}(C_k, C_l, t^o, p, \dots); \quad (2.6)$$

$$r_i^{(n-)} = \sum r_{i,i+z}^{(n-)}(C_i, C_z, t^o, p, \dots); \quad (2.7)$$

де  $r_i^{(n+)}$  є сумарна питома швидкість утворення речовини  $i$  в елементі, що розглядається;  $r_{k,k+l \rightarrow i}^{(n+)}(C_k, C_l, t^o, p, \dots)$  - питома швидкість утворення речовини  $i$  в елементі за рахунок реакції речовини  $k$  з речовиною  $l$ ;  $r_i^{(n-)}$  є сумарна питома швидкість перетворення речовини  $i$  в елементі;  $r_{i,i+z}^{(n-)}(C_i, C_z, t^o, p, \dots)$  - питома швидкість перетворення речовини  $i$  в продукти реакції за рахунок її сполучення з речовиною  $z$ .

Узагальненням закону діючих мас є припущення, яке ґрунтується на теорії молекулярного масопереносу і напівемпіричної теорії турбулентної дифузії, що питомий потік речовини між двома елементами також залежать лише від її вмісту в цих елементах і фізичних умов, якщо елементи контактують через спільну поверхню їх розділу. Відповідно до цього питомий потік речовин до елемента системи  $s$  від інших

елементів системи або довкілля, що з ним контактують, можна виразити через суму питомих потоків речовини до нього від кожного з контактуючих елементів:

$$j_{i,s}^{(n)} = \sum_{s' \neq s} j_{s,s'}^{(n)}(C_{i,s}, C_{i,s'}, t^o, p, \dots); \quad (2.8)$$

де  $j_{i,s}^{(n)}$  є питомий потік речовини  $i$  до елемента  $s$ ;

$j_{s,s'}^{(n)}(C_{i,s}, C_{i,s'}, t^o, p, \dots)$  - питомий потік речовини  $i$  до елемента  $s$  від елемента  $s'$ , що залежить від вмісту  $C_{i,s}$  речовини  $i$  в елементі  $s$ , вмісту  $C_{i,s'}$  речовини  $i$  в елементі  $s'$

і фізичних умов (температури  $t^o$ , тиску  $p$  тощо). Тоді питомий потік усіх речовин до елемента  $s$  від усіх елементів, що з ним контактують можна розрахувати за формулою

$$J_s^{(n)} = \sum_i j_{i,s}^{(n)} = \sum_i \sum_{s' \neq s} j_{s,s'}^{(n)}(C_{i,s}, C_{i,s'}, t^o, p, \dots). \quad (2.9)$$

З урахуванням залежностей (2.6) – (2.8) рівняння (2.5) відносно вмісту певної речовини  $i$  в певному елементі  $s$  системи набуває вигляду

$$\dot{C}_{i,s} = j_{i,s}^{(n)} - J_s^{(n)} C_{i,s} + r_i^{(n+)} - r_i^{(n-)}, \quad (2.10)$$

а закон (2.4) збереження маси елемента  $s$  записується як

$$\dot{M}_s = M_s J_s^{(n)}, \quad (2.11)$$

Зрозуміло, що маси речовин мають зберігатися при перетоках між елементами системи. У математичній формі закон збереження маси речовини  $i$ , що перетікає між елементами  $s$  і  $s'$  і не накопичується на границі між елементами, має вигляд (2.12)

$$M_s j_{s,s'}^{(n)}(C_{i,s}, C_{i,s'}, t^o, p, \dots) = -M_{s'} j_{s',s}^{(n)}(C_{i,s'}, C_{i,s}, t^o, p, \dots)$$

Рівняння (2.10) і (2.11) визначають швидкості зміни вмісту речовин в елементі та його маси і можуть бути складені для кожного елемента системи, що розглядається.

### Робочий приклад 2.1.

Складемо рівняння (2.10) і (2.11) для опису процесів в гіпотетичній замкнутій системі, що складається з двох елементів. Перший елемент є газовою сумішшю двох нереагуючих речовин  $a$  і  $b$ , а другий – водний розчин речовин  $a, b$  і продукта їх реакції  $c$ .

Позначимо вміст речовин  $a$  і  $b$  у першому елементі як  $C_{a,1}$  і  $C_{b,1}$ , а вміст речовин  $a, b$  і  $c$  у другому елементі як  $C_{a,2}$ ,  $C_{b,2}$  і  $C_{c,2}$ . Маса першого і другого елементів позначимо як  $M_1$  і  $M_2$ . У зв'язку з тим, що в газовій фазі речовини не перетворюються і не утворюються, швидкості відповідних реакцій дорівнюють нулю:

$$r_{a,1}^{(n+)} = r_{a,1}^{(n-)} = r_{b,1}^{(n+)} = r_{b,1}^{(n-)} = 0.$$

У водному розчині відбувається перетворення речовин  $a$  і  $b$  на речовину  $c$ , що утворюється, тому замість (2.6) і (2.7) маємо:

$$r_{a,2}^{(n+)} = r_{b,2}^{(n+)} = 0;$$

$$r_{a,2}^{(n-)} = r_{a,a+b,2}^{(n-)}(C_{a,2}, C_{b,2}, t^o, p, \dots);$$

$$r_{b,2}^{(n-)} = r_{b,a+b,2}^{(n-)}(C_{a,2}, C_{b,2}, t^o, p, \dots);$$

$$r_{c,2}^{(n+)} = r_{c,a+b,2}^{(n+)}(C_{a,2}, C_{b,2}, t^o, p, \dots).$$

Речовини  $a$  і  $b$  можуть переходити з розчину у газову фазу, тому формули (2.8) і (2.9) набувають вигляд:

$$j_{a,1}^{(n)} = j_{1,2}^{(n)}(C_{a,1}, C_{a,2}, t^o, p, \dots);$$

$$j_{b,1}^{(n)} = j_{1,2}^{(n)}(C_{b,1}, C_{b,2}, t^o, p, \dots);$$

$$j_{c,1}^{(n)} = j_{1,2}^{(n)}(0, C_{b,2}, t^o, p, \dots) = 0;$$

$$J_1^{(n)} = j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}.$$

Для питомих потоків речовин у зворотньому напрямку з урахуванням (2.12) можемо записати:

$$j_{a,2}^{(n)} = j_{2,1}^{(n)}(C_{a,2}, C_{a,1}, t^o, p, \dots) = -\frac{M_1}{M_2} j_{a,1}^{(n)};$$

$$j_{b,2}^{(n)} = j_{2,1}^{(n)}(C_{b,2}, C_{b,1}, t^o, p, \dots) = -\frac{M_1}{M_2} j_{b,1}^{(n)};$$

$$j_{c,2}^{(n)} = j_{2,1}^{(n)}(C_{c,2}, 0, t^o, p, \dots) = 0;$$

$$J_2^{(n)} = j_{a,2}^{(n)} + j_{b,2}^{(n)} = -\frac{M_1}{M_2} (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) = -\frac{M_1}{M_2} J_1^{(n)}.$$

Наведені формули дозволяють представити рівняння (2.10) і (2.11) для кожного елемента і речовини системи у вигляді

$$\dot{C}_{a,1} = j_{a,1}^{(n)} - (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) C_{a,1}; \quad (2.13)$$

$$\dot{C}_{b,1} = j_{b,1}^{(n)} - (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) C_{b,1}; \quad (2.14)$$

$$C_{c,1} = 0; \quad (2.15)$$

$$\dot{M}_1 = (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) M_1; \quad (2.16)$$

$$\dot{C}_{a,2} = -\frac{M_1}{M_2} j_{a,1}^{(n)} + \frac{M_1}{M_2} (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) C_{a,2} - r_{a,2}^{(n-)}; \quad (2.17)$$

$$\dot{C}_{b,2} = -\frac{M_1}{M_2} j_{b,1}^{(n)} + \frac{M_1}{M_2} (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) C_{b,2} - r_{b,2}^{(n-)}; \quad (2.18)$$

$$\dot{C}_{c,2} = -\frac{M_1}{M_2} (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) C_{c,2} + r_{c,2}^{(n+)}; \quad (2.19)$$

$$\dot{C}_{w,2} = -\frac{M_1}{M_2} (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) C_{w,2}; \quad (2.20)$$

$$\dot{M}_2 = -(j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) M_1, \quad (2.21)$$

де  $C_{w,2}$  є масова частка води у другому елементі системи

### Контрольні запитання до підрозділу 2.1.

1) Як формулюється закон діючих мас?

За одного битого двох небитих дають.  
Прислів'я

### 2.3. Стехіометричні обмеження

Речовини вступають в реакції не в довільних кількостях, а у певних пропорціях, що має накладати відповідні обмеження на швидкості утворенні продуктів реакцій та перетворення її реагентів. Якщо бінарна реакція  $a + b \rightarrow c$  відбувається тільки через перетворення маси  $m_a$  реагента  $a$  та маси  $m_b$  реагента  $b$  з утворенням маси  $m_c$  продукту  $c$ , так що

$$m_a + m_b = m_c, \quad (2.22)$$

то швидкості протікання відповідних реакцій в елементі  $s$  мають задовільняти стехіометричні обмеження

$$\frac{r_{c,a+b \rightarrow c}^{(+)}(C_{a,s}, C_{b,s})}{m_c} = \frac{r_{a,a+b}^{(-)}(C_{a,s}, C_{b,s})}{m_a} = \frac{r_{b,b+a}^{(-)}(C_{b,s}, C_{a,s})}{m_b} \quad (2.23)$$

Стехіометричні обмеження (2.23) надають можливість виразити питомі швидкості реакцій через якусь одну, наприклад:

$$r_{b,b+a}^{(n-)}(C_{b,s}, C_{a,s}) = \frac{m_b}{m_a} r_{a,a+b}^{(n-)}(C_{a,s}, C_{b,s}); \quad (2.24)$$

$$r_{c,a+b \rightarrow c}^{(n+)}(C_{a,s}, C_{b,s}) = \frac{m_c}{m_a} r_{a,a+b}^{(n-)}(C_{a,s}, C_{b,s}), \quad (2.25)$$

що зменшує кількість параметрів, що треба враховувати.

Згідно до закону діючих мас питома швидкість реакції перетворення реагентів пропорційна їх вмісту у елементі системи, тобто:

$$r_{a,a+b}^{(n-)}(C_{a,s}, C_{b,s}) = k_\gamma C_{a,s}^\alpha C_{b,s}^\beta, \quad (2.26)$$

де  $\alpha$  - порядок реакції щодо реагента  $a$ ;  $\beta$  - порядок реакції щодо реагента  $b$ ;  $\gamma = \alpha + \beta$  - загальний порядок реакції.

Параметр реактивного процесу  $k_\gamma$  є функцією фізичних умов

(температура, тиск тощо) середовища, де відбувається реакція, і властивостей реагентів; його називають константою швидкості реакції порядку  $\gamma$ . В моделюванні стану систем довкілля досить поширено застосування реакцій першого порядку з питомими швидкостями

$$r_{a,a+b}^{(n-)}(C_{a,s}, C_{b,s}) = k_1 C_{a,s}, \quad (2.27)$$

де  $k_1$  є коефіцієнт швидкості реакції першого порядку.

#### Робочий приклад 2.2.

Звертаючись до робочого прикладу 2.1, наведемо доказ, що сума швидкостей зміни вмісту усіх речовин в кожному з двох елементів завжди дорівнює нулю, тобто:

$$\dot{C}_{a,1} + \dot{C}_{b,1} \equiv 0;$$

$$\dot{C}_{a,2} + \dot{C}_{b,2} + \dot{C}_{c,2} + \dot{C}_{w,2} \equiv 0.$$

Для цього спочатку сумуємо рівняння (2.13) і (2.14), що дає

$$\begin{aligned} \dot{C}_{a,1} + \dot{C}_{b,1} &= j_{a,1}^{(n)} - (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) C_{a,1} + \\ &+ j_{b,1}^{(n)} - (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) C_{b,1} = \\ &= (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) (1 - C_{a,1} - C_{b,1}) \equiv 0 \end{aligned} \quad (2.28)$$

Із суми рівнянь (2.17) – (2.20) маємо:

$$\begin{aligned} \dot{C}_{a,2} + \dot{C}_{b,2} + \dot{C}_{c,2} + \dot{C}_{w,2} &= \\ &= -\frac{M_1}{M_2} (j_{a,1}^{(n)} + j_{b,1}^{(n)}) (1 - C_{a,2} - C_{b,2} - C_{c,2} - C_{w,2}) - \\ &- r_{a,2}^{(n-)} - r_{b,2}^{(n-)} + r_{c,2}^{(n+)} = -r_{a,2}^{(n-)} - \frac{m_b}{m_a} r_{a,2}^{(n-)} + \frac{m_c}{m_a} r_{a,2}^{(n+)} = \\ &= -\frac{r_{a,2}^{(n-)}}{m_a} (m_a + m_b - m_c) \equiv 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

Ця тотожність завершує доказ.

**Сукупність рівнянь** (2.10), (2.11) з обмеженнями (2.12) і (2.23) відносно вмісту кожної з усіх речовин, з яких побудовані елементи системи, і властивостей реакцій між речовинами, **граничних умов**, що мають визначати потоки речовин між елементами системи і довкілля, **початкових умов**, що задають розподіл речовин по елементах системи в початковий момент часу, **а також розподіл фізичних параметрів** (температури, тиску тощо), від яких залежать величини потоків і швидкості реакцій в системі, **складають разом узагальнену детерміновану модель проточної, детермінованої, динамічної зосередженої в елементах, нелінійної системи навколишнього середовища**. Ця модель має вигляд системи звичайних диференціальних нелінійних рівнянь першого порядку.

Наведена модель не може бути повністю реалізована на практиці принаймні через надзвичайно велику кількість речовин, що складають об'єкти навколишнього середовища, та вражаючи різноманіття реакцій, що в ньому відбуваються. Численні детерміновані математичні моделі, що знайшли широке практичне застосування, є результатом подальших її спрощень. Проте корисність узагальненої моделі полягає, зокрема, у тому, що вона дозволяє виявити деякі фундаментальні властивості систем навколишнього середовища.

### Контрольні запитання до підрозділу 2.3.

- 1) Внаслідок чого виникають стехіометричні обмеження на швидкості реакцій?
- 2) Який математичний вигляд мають стехіометричні обмеження?
- 3) Як визначається порядок реакції щодо її реагентів?
- 4) Що називають коефіцієнтом швидкості реакції?
- 5) Яку розмірність має коефіцієнт швидкості реакції?

### Контрольні завдання до підрозділу 2.3.

- 1) Докажіть, що рівняння (2.24) і (2.25) є наслідком рівнянь (2.23).
- 2) Спробуйте пояснити, чому ліва частина (2.27) тотожно дорівнює нулю.
- 3) Спробуйте пояснити, чому ліва частина (2.28) тотожно дорівнює нулю.

Напочатку Бог створив Небо та землю.  
Перша книга Мойсеєва: "Буття"

## 3. ПРОСТІ ДИНАМІЧНІ МОДЕЛІ ПРИРОДНИХ І БІОІНЖЕНЕРНИХ СИСТЕМ ДОВКІЛЛЯ

### 3.1. Неперервна модель динаміки вмісту неконсервативної речовини у водоймі

У разі потреби в моделюванні певної системи звичайно рекомендується починати з застосування простих моделей процесів, що дозволяють визначити загальні властивості системи і можуть поступово ускладнюватися з метою досягнення бажаної ступені адекватності. Так, якщо маємо оцінити величину вмісту певної забруднюючої речовини у водоймі, що надходить зі скидами, то доцільно спочатку його представити проточною системою, що обмінюється речовинами з довкіллям і складається з одного однорідного елемента, який вміщує забруднюючу речовину та усі інші речовини разом у частках  $C$  і  $C_w$ , відповідно:

$$C + C_w = 1. \quad (3.1)$$

Будемо вважати, що забруднююча речовина надходить до водойми з кількома притоками, що мають різні потоки маси  $j_i$  і вміщують речовину у різних масових частках  $C_i$ . Тоді потоки маси забруднюючої речовини до водойми з різними притоками дорівнюють

$$j_{C,i} = j_i C_i. \quad (3.2)$$

Будемо також вважати, що з водойми виходять два потоки маси  $f_1$  і  $f_2$ , перший з яких вміщує забруднюючу речовину з вмістом  $C$ , а другий - її не містить.

Якщо забруднююча речовина може знешкоджуватися у водоймі, перетворюючись у інші сполуки, то її називають **неконсервативною речовиною**. Питома швидкість реакції перетворення неконсервативної речовини у першому наближенні може бути прийнята за видом (2.27) реакції першого порядку:

$$r_C^{(n-)} = k C, \quad (3.3)$$

де коефіцієнт  $k$  називають **коефіцієнтом неконсервативності**.

Якщо позначити масу усіх речовин водойми через  $M$ , то сумарний питомий потік усіх речовин до водойми визначиться як

$$J^{(n)} = \frac{1}{M} (\sum j_i - f_1 - f_2), \quad (3.4)$$

а сумарний питомий потік забруднюючої речовини до водойми має бути рівним

$$j_C^{(n)} = \frac{1}{M} (\sum j_{C,i} - f_1 C) = \frac{1}{M} (\sum j_i C_i - f_1 C). \quad (3.5)$$

З урахуванням співвідношень (3.3) – (3.5) рівняння (2.10) і (2.11) набудуть вигляду

$$\begin{aligned} \dot{C} &= \frac{1}{M} (\sum j_i C_i - f_1 C) - \frac{1}{M} (\sum j_i - f_1 - f_2) C - k C = \\ &= \frac{1}{M} \sum j_i C_i - \left[ \frac{1}{M} (\sum j_i - f_2) + k \right] C \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\dot{M} = \sum j_i - f_1 - f_2, \quad (3.7)$$

Якщо ввести нові позначення:

$$\tau = \frac{M}{\sum j_i - f_2 + M k}; \quad (3.8)$$

$$C_{st} = \frac{\tau}{M} \sum j_i C_i, \quad (3.9)$$

то рівняння (3.6) набуває вигляд

$$\dot{C} = \frac{1}{\tau} (C_{st} - C). \quad (3.10)$$

Величину  $\tau$  називають **часом утримання речовини у водоймі**. Разом з початковими умовами

$$C(t=0) = C_0; \quad (3.11)$$

$$M(t=0) = M_0, \quad (3.12)$$

рівняння (3.7) і (3.10) повністю визначають залежність  $C(t)$  вмісту забруднюючої речовини у водоймі від часу, якщо визначені залежності від часу входів системи  $j_i(t)$ ,  $C_i(t)$ ,  $f_1(t)$ ,  $f_2(t)$ .

**Стационарним станом системи** називають стан, у якому всі її змінні є постійними величинами. Стационарний стан простої системи, що розглядається, встановлюється за умов

$\dot{C} = 0$  та  $\dot{M} = 0$ . Відповідно до цього з рівнянь (3.7) і (3.10) знайдемо

$$\sum j_i - f_2 = f_1; \quad (3.13)$$

$$C = C_{st} = \frac{\sum j_i C_i}{f_1 + M k}. \quad (3.14)$$

Якщо початковий вміст  $C_0$  речовини у водоймі не дорівнює стационарному вмісту  $C_{st}$ , то процес  $C(t)$  наближення вмісту до стационарного відбувається за рівнянням (3.10) і має вигляд

$$C(t) = C_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) + C_{st} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right]. \quad (3.15)$$

### Робочий приклад 3.1.

Розглянемо модельну водойму з об'ємом водної маси  $W = 1750000 \text{ м}^3$ , що приймає два притоки з витратами води  $Q_1 = 2,3 \text{ м}^3/\text{с}$  та  $Q_2 = 3,7 \text{ м}^3/\text{с}$  і вмістом забруднюючої речовини  $C_1 = 2,6 \text{ мг/дм}^3$  і  $C_2 = 9,6 \text{ мг/дм}^3$ . Річковий сток з водойми становить  $Q = 5,2 \text{ м}^3/\text{с}$ . Коефіцієнт неконсервативності становить  $k = 0,26 \text{ 1/добу}$ . Треба розрахувати стационарну концентрацію речовини, що встановиться у водоймі.

Розрахунок проводимо за формулою (3.14), що відповідно до вихідних даних набуває вигляду:

$$C_{st} = \frac{\sum Q_i C_i}{Q + W k} = \frac{2,3 \cdot 2,6 + 3,7 \cdot 9,6}{5,2 + 1,75 \cdot 10^6 \cdot 0,26 / 86400} \text{ мг/дм}^3 \approx 4,0 \text{ мг/дм}^3 \quad (3.16)$$

#### Контрольні запитання до підрозділу 3.1.

- 1) Який сенс у застосуванні простих математичних моделей систем довкілля?
- 2) З яким природним стоком водойму може залишати лише чиста вода?
- 3) Якщо вміст неконсервативної речовини у водоймі в стаціонарному стані визначається за формулою (3.14), то за якою формулою можна визначити вміст усіх інших речовин у цьому випадку?
- 4) Яким чином формула (3.14) набуває вигляду (3.16)?
- 5) Для чого серед вихідних даних у співвідношенні (3.16) з'являється число 86400 і що воно показує?

#### Контрольні завдання до підрозділу 3.1.

- 1) Виходячи з формули (3.15) щодо певної неконсервативної речовини виведіть формулу для розрахунку залежності від часу вмісту  $C_w(t)$  усіх інших речовин у водоймі.
- 2) За вихідними даними робочого прикладу 3.1 розрахуйте час утримання забруднюючої речовини у водоймі.
- 3) За вихідними даними робочого прикладу 3.1 розрахуйте вміст забруднюючої речовини, що вона набуде у водоймі через  $t = 0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 3; 3,5; 4; 4,5$  і 5 діб.
- 4) Побудуйте графік зміни вмісту неконсервативної речовини у водоймі з часом за даними попередніх розрахунків.
- 5) **Консервативною** називають речовину, якщо вона не вступає у реакції у водоймі з іншими речовинами. Коефіцієнт неконсервативності  $k$  консервативних речовин дорівнює нулю. Виведіть формули для розрахунку вмісту консервативної речовини у водоймі.
- 6) Визначте на скільки зміниться час утримання речовини у водоймі, якщо вона є консервативною.
- 7) Докажіть, що формула (3.15) є рішенням рівняння (3.10) з початковою умовою (3.11).

### 3.2. Непереривна модель процесу очистки стічної води у біореакторі-дозаторі

**Біореактором** називають пристрій або споруду для очистки стічних вод з використанням мікроорганізмів. Очисні споруди, що включають один або кілька біореакторів є **біоінженерною системою**. Моделі простих біореакторів і біоінженерних систем широко використовуються на практиці.

**Біореактор-дозатор** є технічною системою, що працює в циклічному режимі. У фазі завантаження в біореактор заливається певна маса стічної води, що містить забруднюючу речовину у кількості, яка перевищує норматив її гранично допустимого скиду у навколишнє середовище. У цей розчин додається реагент - мікроорганізми, для яких забруднююча речовина є субстратом. Ця суміш перемішується у біореакторі на протязі певного **часу утримання  $\tau$** , з перебігом якого мікроорганізми розкладають забруднюючу речовину, перетворюючи її частково у свою біомасу і частково у розчинені у воді продукти розкладу. Робочий цикл завершується вивантаженням суміші до відстойника. У процесі очистки стічної води до суміші постачають інші речовини, що необхідні для розвитку мікроорганізмів (наприклад, кисень) у достатній кількості, так що саме вміст субстрата є лімітуючим фактором їх розвитку.

Взагалі, **лімітуючими факторами** називають фактори, що обмежують швидкість реакцій або процесів у системі. Вони в першу чергу підлягають урахуванню в моделях систем. Метою моделювання є визначення зміни у часі вмісту забруднюючої речовини в стічній воді, що проходить очистку, в залежності від початкових умов і параметрів системи. Для виводу простої моделі біореактора-дозатора будемо його розглядати як систему з одного однорідного елементу, що складається з забруднюючої речовини (її вміст позначимо як  $P$ ), біомаси мікроорганізмів (їх вміст -  $B$ ) і решти речовин, вміст яких не є лімітуючим фактором. Символами  $P_0$  і  $B_0$  позначимо вміст речовини та біомаси мікроорганізмів у біореакторі на початку процесу очистки. Решту речовин залишаємо поза увагою. Якщо стічна вода і мікроорганізми не додаються до системи в процесі очистки, то по відношенню до цих "речовин" система є непроточною і рівняння (2.10)

набувають вигляд

$$\dot{P} = -r_{P \rightarrow B}^{(-)}(P, B); \quad (3.17)$$

$$\dot{B} = r_{P \rightarrow B}^{(+)}(B, P). \quad (3.18)$$

Реакції (3.17) і (3.18) протікають так, що мікроорганізми, перетворюючи речовину-субстрат у кількості  $\Delta p$ , збільшують свою біомасу на величину  $\Delta b$ . Це дозволяє залучити стехіометричне обмеження (2.23) у вигляді

$$\frac{r_{P \rightarrow B}^{(+)}(B, P)}{\Delta b} = \frac{r_{P \rightarrow B}^{(-)}(P, B)}{\Delta p}. \quad (3.19)$$

Нарешті, питому швидкість реакції біохімічного окислення субстрату визначимо як швидкість реакції другого порядку

$$r_{P \rightarrow B}^{(-)}(P, B) = k_2 PB, \quad (3.20)$$

де  $k_2$  є коефіцієнт швидкості реакції.

З урахуванням наведених співвідношень та початкових умов процесу математична модель очистки стічної води в біореакторі-дозаторі набуває вигляд

$$\dot{P} = -k_2 PB; \quad (3.21)$$

$$\dot{B} = Yk_2 PB; \quad (3.22)$$

$$P(t=0) = P_0; \quad (3.23)$$

$$B(t=0) = B_0, \quad (3.24)$$

де  $Y = \Delta b / \Delta p$  є *коефіцієнт урожайності*, що кількісно дорівнює приросту біомаси мікроорганізмів на одиницю перетвореної маси речовини-субстрата.

Ця нелінійна система двох звичайних диференціальних рівнянь першого порядку має аналітичне рішення

$$A = YP_0 + B_0; \quad (3.25)$$

$$P(t) = \frac{AP_0}{YP_0 + B_0 \exp(k_2 A t)}; \quad (3.26)$$

$$B(t) = \frac{A}{1 + \left( \frac{A}{B_0} - 1 \right) \exp(-k_2 A t)}. \quad (3.27)$$

Формули (3.25) – (3.27) складають аналітичну модель біореактора-дозатора. За формулами (3.26) і (3.27) визначається вміст речовини-субстрата  $P(t = \tau)$  і біомаси мікроорганізмів  $B(t = \tau)$  у стічній воді після очистки. Стічна вода за час утримання  $\tau$  стає сумішшю, яку складають  $P(\tau)$  часток залишків речовини,  $B(\tau)$  часток біомаси мікроорганізмів і  $1 - P(\tau) - B(\tau)$  часток припадає на решту речовин.

### Контрольні запитання до підрозділу 3.2.

- 1) Яку споруду називають біореактором-дозатором?
- 2) Що називають лімітуючими факторами процесів у системах?
- 3) Як визначається коефіцієнт урожайності?
- 4) Чим забезпечується однорідність розподілу речовин у робочому об'ємі біореактора?

### Контрольні завдання до підрозділу 3.2.

- 1) Докажіть, що сума  $B(t) + YP(t)$  залишається незмінною в процесі очистки стічної води у біореакторі-дозаторі.
- 2) Перевірте, що функції (3.26) і (3.27) задовільняють початкові умови (3.23) і (3.24).
- 3) Перевірте, що функції (3.26) і (3.27) дійсно є рішеннями рівнянь (3.21) і (3.22).
- 4) Виходячи з рівняння (3.26), виведіть формулу для розрахунку часу утримання стічної води у біореакторі-дозаторі, що потрібен для зниження початкового вмісту забруднюючої речовини  $P_0$  до вмісту  $P_{\bar{A}\bar{A}\bar{N}}$ , що відповідає нормативу ГДС.
- 5) Користуючись властивістю процесу, що доказана у першому завданні, спробуйте самостійно знайти рішення системи рівнянь (3.21) і (3.22).

### 3.3. Непреривна модель процесу очистки стічної води у біореакторі-змішувачі

Ідеальний **біореактор-змішувач** це - проточна система, що працює у неперивному режимі з примусовим перемішуванням суміші у його робочому об'ємі, який вміщує постійну масу  $M$  завдяки тому, що потік маси  $J_M$  усіх речовин на вході дорівнює потоку маси на виході з реактора. **Час утримання** для реактора-змішувача визначається за формулою  $\tau = M/J_M$ . Перемішування забезпечує однорідність розподілу речовин у робочому об'ємі, завдяки чому вміст речовини-субстрата  $P$  і біомаси мікроорганізмів  $B$  на виході з реактора такий же самий, як і у його робочому об'ємі.

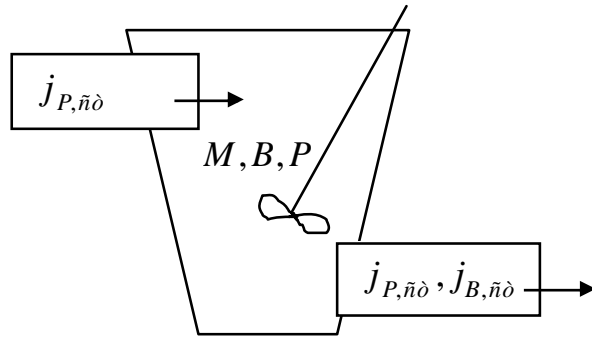


Рис. 1 - Блок-схема системи біореактора-змішувача

Постійними також є питомий потік  $j_{P, \bar{n}\delta}^{(n)} = P_{\bar{n}\delta}/\tau$  речовини-субстрата на вході до робочого об'єму, де  $P_{\bar{n}\delta}$  є вміст речовини-субстрата у стічній воді, і питомі потоки речовини-субстрата  $j_P^{(n)} = P/\tau$  і біомаси мікроорганізмів  $j_B^{(n)} = B/\tau$  на виході.

За припущень підрозділу 3.2 щодо виду реакції претворення речовини-субстрата рівняння моделі системи набувають вигляд

$$\dot{P} = \frac{P_{\bar{n}\delta} - P}{\tau} - k_2 P B, \quad (3.28)$$

$$\dot{B} = B \cdot \left( Y k_2 P - \frac{1}{\tau} \right). \quad (3.29)$$

Система двох нелінійних диференціальних рівнянь першого порядку (3.28) і (3.29) разом з початковими умовами (3.23), (3.24) складають математичну модель ідеального біореактора-змішувача.

Величини змінних, що відповідають стаціонарному стану системи знаходимо з рівнянь

$$\begin{cases} \frac{P_{\bar{n}\delta} - P}{\tau} - k_2 P B = 0; \\ B \cdot \left( Y k_2 P - \frac{1}{\tau} \right) = 0. \end{cases} \quad (3.30)$$

Система двох алгебраїчних рівнянь (3.30) є нелінійною і має два рішення, що відповідають двом різним стаціонарним станам системи:

$$1) B_1^* = 0, P_1^* = P_{\bar{n}\delta}; \quad (3.31)$$

$$2) B_2^* = Y P_{\bar{n}\delta} - \frac{1}{k_2 \tau}, P_2^* = \frac{1}{Y k_2 \tau}. \quad (3.32)$$

Щоб встановити, який з двох стаціонарних станів дійсно прийме система, надамо малих відхилень  $y_1$  і  $y_2$  змінним системи, що відповідають першому стаціонарному стану, тобто переведемо її у стан  $P = P_1^* + y_1$ ,  $B = B_1^* + y_2$  та з'ясуємо, як піде процес його зміни з часом. Підставляя нові змінні у рівняння (3.28), (3.29) і нехтуючи доданками другого порядку малості, знайдемо рівняння щодо наданих відхилень у вигляді

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = -\frac{y_1}{\tau} - k_2 P_{\bar{n}\delta} y_2; \\ \dot{y}_2 = a y_2 \end{cases} \quad (3.33)$$

$$a = Y k_2 P_{\bar{n}\delta} - \frac{1}{\tau}. \quad (3.34)$$



Рішення системи (3.33) шукаємо у вигляді

$$y_1(t) = y_{1,0} \exp(\lambda t), \quad y_2(t) = y_{2,0} \exp(\lambda t), \quad (3.35)$$

де величини  $y_{1,0}$  і  $y_{2,0}$  є константами, а число  $\lambda$  має бути визначеним. Підстановка цих функцій перетворює систему (3.33) в алгебричну

$$\begin{cases} \left( \lambda + \frac{1}{\tau} \right) y_{1,0} + k_2 P_{\bar{n}\delta} y_{2,0} = 0; \\ (\lambda - a) y_{2,0} = 0. \end{cases} \quad (3.36)$$

Визначник алгебричної системи (3.36) має два корені  $\lambda_1 = -1/\tau$ ,  $\lambda_2 = a$ . Якщо обидва корені є від'ємними величинами, що забезпечується при додержання умови  $0 < \tau < 1/YkP_{cm}$ , то малі відхилення будуть зменшуватись у часі і система перейде у перший стаціонарний стан. За таких умов кажуть, що стаціонарний стан системи є **станом сталої рівноваги**.

Для другого рівноважного стану рівняння відносно малих відхилень отримуємо аналогічним чином у вигляді

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = -k_2 Y P_{\bar{n}\delta} y_1 - \frac{1}{Y\tau} y_2; \\ \dot{y}_2 = Y \left( k_2 Y P_{\bar{n}\delta} - \frac{1}{\tau} \right) y_1. \end{cases} \quad (3.37)$$

Рівняння, що визначає показники  $\lambda$  експоненти в рішенні (3.35) системи (3.37), у цьому випадку приймає вигляд

$$\lambda^2 + k_2 Y P_{\bar{n}\delta} \lambda + \frac{1}{\tau} \left( k_2 Y P_{\bar{n}\delta} - \frac{1}{\tau} \right) = 0.$$

Його коренями є  $\lambda_1 = -1/\tau$  і  $\lambda_2 = -k_2 Y P_{\bar{n}\delta} + 1/\tau$ . Таким чином, умовою сталої рівноваги системи у другому стаціонарному стані є  $\tau > 1/Yk_2 P_{\bar{n}\delta} > 0$ .

З наведеного розгляду моделі можна зробити наступні висновки:

- якщо час утримання  $\tau$  ідеального біореактора-

змішувача з однорідним розподілом мікроорганізмів у робочому об'ємі малий, а саме

$$0 < \tau < 1/Yk_2 P_{\bar{n}\delta}, \quad (3.38)$$

то процес очистки стічної води припиняється через повне вилучення мікроорганізмів з реактора ( $B_1^* = 0$ );

- якщо час утримання достатньо великий, а саме

$$\tau > 1/Yk_2 P_{\bar{n}\delta}, \quad (3.39)$$

то процес очистки відбувається і залишковий вміст речовини-субстрата на виході  $P_2^* = 1/Yk_2 \tau$  не залежить від її вмісту на вході реактора а залежить лише від часу утримання і властивостей популяції мікроорганізмів.

Величини параметрів за якими відбувається різка зміна стану системи називають **точками біфуркації системи**. Таким чином, величина часу утримання  $\tau = \tau_{\delta\delta} = 1/Yk_2 P_{\bar{n}\delta}$  є точкою біфуркації стану біореактора-змішувача.

Якщо спеціальними заходами створюються умови сталого закріплення біомаси  $B = const$  у робочому об'ємі, то з рівняння (3.28) за початковою умовою  $P(t=0) = P_0$  знайдемо

$$P(t) = \frac{P_{\bar{n}\delta}}{1 + Bk_2 \tau} + \left( P_0 - \frac{P_{\bar{n}\delta}}{1 + Bk_2 \tau} \right) \exp \left[ - \left( \frac{1}{\tau} + Bk_2 \right) t \right]. \quad (3.40)$$

Як показує ця формула, з плином часу, якщо запобігти виносу мікроорганізмів з робочого об'єму біореактора, процес очистки обов'язково виходить на сталий режим з вмістом речовини-субстрата на виході реактора  $P_{\hat{a}\delta\delta}$ , залежним від її вмісту на вході:

$$P_{\hat{a}\delta\delta} = \frac{P_{\bar{n}\delta}}{1 + Bk_2 \tau}. \quad (3.41)$$

### Контрольні запитання до підрозділу 3.3.

- 1) У чому полягає схожість і різниця моделей біореактора-дозатора і біореактора-змішувача?

- 2) Що називають станом сталої рівноваги системи?
- 3) Який стаціонарний стан системи можна назвати станом несталої рівноваги?
- 4) Що називають точками біфуркації системи?
- 6) Що відбудеться з біореактором-змішувачем, якщо час утримання стічної води стане занадто малим?

### Контрольні завдання до підрозділу 3.3.

1) Виразіть у математичному вигляді умови сталості стаціонарних режимів біореактора-змішувача (3.37), (3.38) через змінні, що визначають час утримання.

2) Перевірте, що підстановка функцій (3.35) у систему рівнянь (3.33) дійсно перводить її у алгебричну форму (3.36).

3) Запишіть систему алгебричних рівнянь, у яку перетворюється система рівнянь (3.37) підстановкою (3.35), та знайдіть визначник отриманої алгебричної системи.

4) Покажіть, що функція (3.40) дійсно є рішенням рівняння (3.28), якщо  $B = \text{const}$ .

5) Виходячи з рівняння (3.41), виведіть формулу для розрахунку часу утримання стічної води у біореакторі-змішувачі з закріпленою біомасою мікроорганізмів, що потрібен для зниження початкового вмісту забруднюючої речовини  $P_{\tilde{A}\tilde{N}}$  до вмісту  $P_{\tilde{A}\tilde{N}}$ , що відповідає нормативу ГДС.

### 3.4. Непреривна модель процесу очистки стічної води у біореакторі-вигискувачі

У біореакторі-вигискувачі вилучення речовини-субстрату відбувається у потоці стічної води, що рухається з постійною швидкістю вздовж споруди з закріпленою біотою. Біореактор такого типу є розподіленою системою, де вміст речовини залежить від відстані до входу стічної води в біореактор. Модель розподіленої системи отримується складанням балансу маси речовин для кожного її **елементарного об'єму (елементу)**, на які умовно поділяється система, щоб забезпечити однорідність розподілу речовин в межах кожного досить малого елемента (рис. 2).

Питомий потік речовини  $j_p^{(n)}(x, t)$  через лівий умовний переріз потоку, що є лівою границею елементарного об'єму з

малою довжиною  $dx$ , відрізняється від її питомого потоку

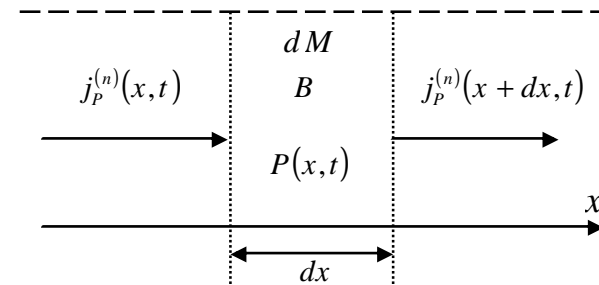


Рис. 2 - Параметри елементарного об'єму біореактора

через праву границю  $j_p^{(n)}(x + dx, t)$  на малу величину

(3.42)

$$\Delta j_p^{(n)}(x, t) = j_p^{(n)}(x, t) - j_p^{(n)}(x + dx, t) = -dx \frac{\partial}{\partial x} j_p^{(n)}(x, t)$$

За схемою реакції пертворення другого порядку рівняння балансу маси речовини для елементарного об'єму приймає вигляд

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = -dx \frac{\partial}{\partial x} j_p^{(n)}(x, t) - k_2 B P(x, t). \quad (3.43)$$

Питомий потік маси речовини через довільний переріз задається виразом

$$j_p^{(n)}(x, t) = \frac{1}{dM} \left[ J_M P(x, t) - E_M \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) \right], \quad (3.44)$$

де  $dM$  є маса елементарного об'єму;  $J_M$  - постійний потік маси суміші в системі;  $E_M$  - динамічний коефіцієнт дисперсії речовини, яка виникає внаслідок турбулентності та неоднорідності руху рідини. Підстановкою (1.46) в (1.45) отримуємо рівняння відносно розподілу вмісту речовини в системі:

(3.45)

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = -U \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) + E \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) - k_2 B P(x, t).$$

де  $U = J_M dx/dM$  – постійна середня швидкість руху маси суміші через переріз;  $E = E_M dx/dM$  – кінематичний коефіцієнт дисперсії речовини.

Як вже підкреслювалось раніше, у стаціонарному стані біореактора усі процеси не залежать від часу, тому рівняння моделі стаціонарного стану розглядаємої розподіленої системи є звичайним диференціальним рівнянням другого порядку

$$E \frac{d^2}{dx^2} P(x) - U \frac{d}{dx} P(x) - k_2 B P(x) = 0. \quad (3.46)$$

Рішення рівняння (3.46) щодо стаціонарного вмісту речовини шукаємо підстановкою  $P(x) = a \exp(\lambda x)$ , яка задовільняє рівняння (3.45), якщо  $\lambda$  є коренем алгебричного рівняння

$$E \lambda^2 - U \lambda - k_2 B = 0. \quad (3.47)$$

Рівняння (3.46) має два корені

$$\lambda_{1,2} = \frac{U \pm \sqrt{U^2 + 4Bk_2E}}{2E},$$

але лише корінь з від'ємним знаком радикала дає обмежене із зростанням координати  $x$  рішення, що у цьому випадку має фізичний сенс.

Таким чином формула стаціонарного розподілу речовини-субстрата вздовж біореактора має вигляд

$$P(x) = P(0) \exp\left(\frac{U - \sqrt{U^2 + 4Bk_2E}}{2E} x\right), \quad (3.48)$$

де  $P(0)$  є вміст речовини на вході суміші до реактору.

Залежність вмісту речовини на виході з реактора від її вмісту на вході визначається параметрами процесу і довжиною біореактора  $L$  за формулою (3.48), де замість  $x$  слід підставляти  $L$ .

### Робочий приклад 3.2.

Виконаємо розрахунок довжини  $L$  системи, що забезпечує зменшення вмісту  $P(0) = 50$  мг/кг речовини у стічній воді на вході біореактора-витискувача до величини  $P(L) = 10$  мг/кг на виході з нього. Вихідні дані для розрахунку:  $U = 0,1$  м/с;  $B = 4000$  мг/кг;  $k_2 = 5 \cdot 10^{-7}$  кг/мг·с;  $E = 0,05$  м²/с.

Розрахункову формулу отримаємо, логарифмуючи рівняння (3.48), у вигляді

$$L = \frac{2E}{\sqrt{U^2 + 4Bk_2E} - U} \exp\left(\frac{P(0)}{P(L)}\right). \quad (3.49)$$

Розрахунок дає результат  $L = 81$  м.

### Контрольні запитання до підрозділу 3.4.

- 1) У чому полягає схожість і різниця моделей біореактора-змішувача і біореактора-витискувача?
- 2) Який прийом застосовують при розгляді розподіленої системи, щоб вивести рівняння балансу маси речовин?
- 3) Чому рішення рівняння (3.46), що відповідає додатньому корню рівняння (3.47), не є придатним для розрахунків?

### Контрольні завдання до підрозділу 3.4.

- 1) Покажіть, що функція (3.47) дійсно є рішенням рівняння (3.46).
- 2) Спробуйте знайти рішення рівняння (3.46) за додатковою умовою  $E = 0$ .
- 3) Перевірте, чи правильно виконано розрахунок у робочому прикладі 3.2.

### 3.5. Дискретна модель процесу очистки стічної води у біореакторі-змішувачі

У підрозділі 3.3 наведена система рівнянь математичної моделі процесу очистки стічної води у біореакторі-змішувачі:

$$\dot{P} = \frac{P_{\text{вх}} - P}{\tau} - k_2 P B, \quad (3.50)$$

$$\dot{B} = B \cdot \left( Yk_2 P - \frac{1}{\tau} \right) \quad (3.50a)$$

і формули для розрахунку змінних стаціонарного стану процесу. Проте питання, як саме процес набуває стаціонарного стану, залишається не з'ясованим через відсутність аналітичного рішення системи.

Взагалі, математичні моделі, що застосовуються на практиці у дослідженнях систем довкілля, завжди мають бути доведені “до числа”. Саме результати модельних розрахунків мають цінність з огляду на мету кількісного аналізу реакцій певного об'єкту на зовнішні впливи. Звертаючись до математичної моделі загального виду (2.10), (2.11), можна зазначити, що отримання її аналітичних рішень у складних випадках неможливо. Саме тому широкого застосування на практиці знайшли різноманітні методи наближених числових рішень.

Для цього неперервна у часі система наближається дискретною системою, що може змінювати свій стан лише стрибками за певний часовий інтервал  $\Delta t$ . Тоді система диференціальних рівнянь методами скінченно-різницевої апроксимації перетворюється на систему алгебричних рівнянь відносно змінних дискретної системи.

Для прикладу наведемо метод Рунге-Кутта другого порядку апроксимації для розв'язання двох звичайних диференціальних рівнянь (3.50), (3.50a), що складають модель біореактора-змішувача. За визначеними в момент часу  $t_n$  величинами змінних  $P(t=t_n)=P_n$  і  $B(t=t_n)=B_n$  система рівнянь, що визначає наступні у момент часу  $t_{n+1}=t_n+\Delta t$  величини змінних  $P_{n+1}$  і  $B_{n+1}$ , має вигляд

$$\frac{P_{n+1}-P_n}{\Delta t} = \frac{P_{\bar{n}\partial}-P_{n+1/2}}{\tau} - k_2 P_{n+1/2} B_{n+1/2}; \quad (3.51)$$

$$\frac{B_{n+1}-B_n}{\Delta t} = B_{n+1/2} \cdot \left( Yk_2 P_{n+1/2} - \frac{1}{\tau} \right), \quad (3.52)$$

де величини  $P_{n+1/2}$  і  $B_{n+1/2}$  визначаються за формулами

$$\frac{P_{n+1/2}-P_n}{0,5\Delta t} = \frac{P_{\bar{n}\partial}-P_n}{\tau} - k_2 P_n B_n; \quad (3.53)$$

$$\frac{B_{n+1/2}-B_n}{0,5\Delta t} = B_n \cdot \left( Yk_2 P_n - \frac{1}{\tau} \right), \quad (3.54)$$

Розрахунок виконується у два шага. Спочатку за формулами (3.53), (3.54) у вигляді

$$P_{n+1/2} = P_n + 0,5\Delta t \left( \frac{P_{\bar{n}\partial}-P_n}{\tau} - k_2 P_n B_n \right); \quad (3.55)$$

$$B_{n+1/2} = B_n + 0,5\Delta t B_n \left( Yk_2 P_n - \frac{1}{\tau} \right), \quad (3.56)$$

розраховують величини  $P_{n+1/2}$  і  $B_{n+1/2}$ , а потім – величини  $P_{n+1}$  і  $B_{n+1}$  за формулами (3.51), (3.52) у вигляді

$$P_{n+1} = P_n + \Delta t \left( \frac{P_{\bar{n}\partial}-P_{n+1/2}}{\tau} - k_2 P_{n+1/2} B_{n+1/2} \right); \quad (3.57)$$

$$B_{n+1} = B_n + \Delta t B_{n+1/2} \cdot \left( Yk_2 P_{n+1/2} - \frac{1}{\tau} \right). \quad (3.58)$$

Розрахунки за формулами проводять, починаючи з початкових умов  $P_0$  і  $B_0$ , доки не буде досягнутий кінцевий момент часу  $t_N$  часового періоду, що моделюється.

Другий порядок скінченно-різницевої апроксимації (3.55) – (3.59) системи рівнянь (3.50), (3.50a) позначає, що похибка розрахунків є величиною порядку  $(\Delta t)^2$  і швидко зменшується із зменшенням часового шагу  $\Delta t$ . Виконання таких розрахунків значно полегшують спеціалізовані комерційні програмні продукти, такі як Mathcad®, Mathematica® або Excel®.

### Робочий приклад 3.3.

Спробуємо встановити як буде змінюватись у часі вміст забруднюючої речовини і біомаси мікроорганізмів у біореакторі

за такими вихідними даними:  $Y = 0,5$ ;  $k_2 = 5 \cdot 10^{-7} \text{ кг/мг} \cdot \text{с}$ ;  $\tau = 48$  годин;  $P_{\text{н}0} = 100 \text{ мг/кг}$ .

Для розрахунку обираємо часовий шаг  $\Delta t = 2$  години і часовий інтервал моделювання процесу 240 годин. Склавши в Excel® відповідну програму і виконавши розрахунок можна отримати рис. 3, що наочно відображує хід процесу очистки у біореакторі-витискувачі.

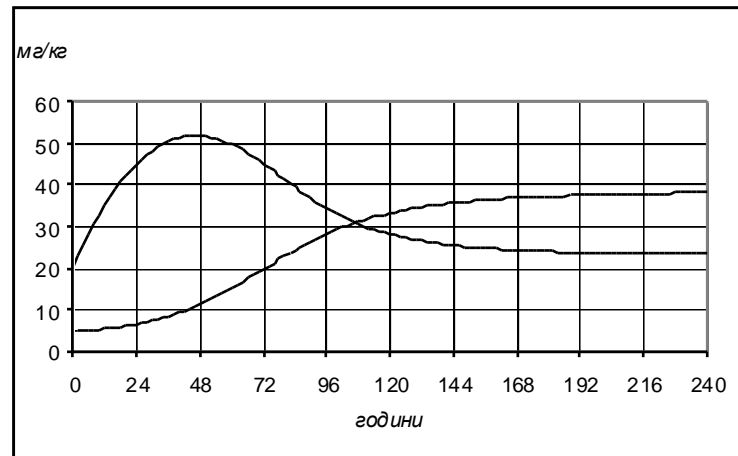


Рис. 3 - Зміна з часом вмісту речовини (суцільна лінія) і біомаси мікроорганізмів (пунктир) у біореакторі

### Контрольні запитання до підрозділу 3.5.

- 1) Коли з'являється необхідність використовувати скінченно-різницеві апроксимації диференціальних рівнянь?
- 2) Що показує порядок скінченно-різницевої апроксимації?

### Контрольні завдання до підрозділу 3.5.

- 1) Визначить точку біфуркації системи за даними робочого прикладу 3.3.
- 2) Спробуйте скласти в Excel® програму розрахунку змінних процесу очистки стічної води у біореакторі-витискувачі, провести розрахунки за даними робочого прикладу 3.3 і надати графічного відображення процесу.

### 3.6. Дискретна модель динаміки чисельності популяції організмів

Розглянемо динаміку розвитку популяції організмів, чисельність якої  $N_{n+1}$  у момент часу  $t_{n+1}$  змінюється за рахунок народження нових організмів “стрибком”, тобто за дуже короткий час у порівнянні з проміжком часу  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$  між двома послідовними періодами народження нових організмів. Якщо приріст чисельності (розміру) популяції відбувається пропорційно до наявного її розміру  $N_n$  у попередній момент часу  $t_n$ , а зменшення – пропорційно до  $N_n^2$  через внутрішньовидову конкуренцію за обмежений ресурс виживання, то динаміка розвитку популяції відображується дискретною моделлю

$$N_{n+1} = bN_n - dN_n^2 = bN_n \left( 1 - \frac{d}{b} N_n \right), \quad (3.59)$$

де  $b$  є коефіцієнт розмноження, а  $d$  - коефіцієнт конкуренції. Якщо ввести безрозмірну чисельність (розмір) популяції  $a_n = N_n d/b$ , то рівняння (3.59) набуває вигляду

$$a_{n+1} = ba_n(1 - a_n), \quad (3.60)$$

Рівняння (3.60) разом з початковою умовою

$$a_n|_{n=0} = a_0, \quad (3.61)$$

де  $a_0$  є початковий розмір популяції, складають дискретну модель динаміки чисельності популяції організмів з внутрішньовидовою конкуренцією.

Стаціонарного стану популяція досягає, коли її розмір  $a$  стало повторюється  $a_{n+1} = a_n = a$  з кожним циклом репродукції нових організмів. Підстановка  $a$  у рівняння (3.60) замість  $a_{n+1}$  і  $a_n$  дозволяє отримати квадратичне рівняння відносно стаціонарного розміру  $a$  популяції, рішення якого має вигляд

$$a = \frac{1-b}{b}. \quad (3.62)$$

Модель (3.60) запропонував Р. Мей у 1976 році для демонстрації дуже складної динаміки, що може бути притаманною навіть простим системам довкілля. Результати розрахунків, що ілюструють особливості моделі (3.60), отримані засобами Excel<sup>®</sup> і наведені у робочому прикладі 3.4.

#### Робочий приклад 3.4.

Наведемо графічне відображення процесу зміни розміру популяції при різних величинах коефіцієнта розмноження  $b$ .

На рис. 4 зображені графіки зміни розміру популяції у часі ( $a_0 = 0,2$ ), коли  $b$  дорівнює 0,5 (суцільна лінія), 1,5 (штрихова лінія) і 2,5 (пунктирна лінія). З графіків видно, що популяція за кілька ітерацій досягає сталого стаціонарного розміру.

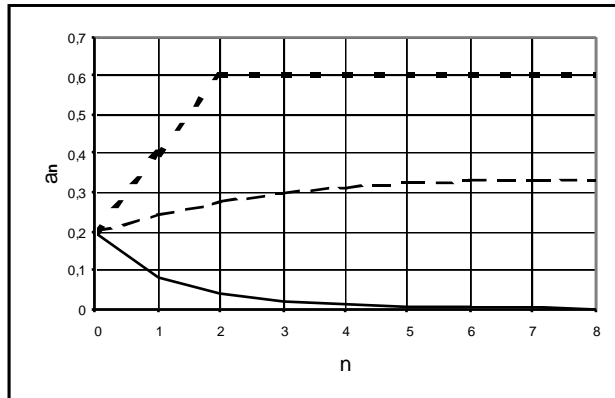


Рис. 4 - Зміна розміру популяції у часі, якщо коефіцієнт розмноження знаходиться у межах  $0 < b < 3$

На рис. 5 зображені графіки зміни розміру популяції з часом ( $a_0 = 0,2$ ), коли  $b$  дорівнює 3,2 (суцільна лінія), 3,46 (штрихова лінія) і 3,56 (пунктирна лінія). З графіків видно, що популяція вже не досягає сталого стаціонарного розміру, а виходить на режим коливань з періодом 2, 4 і 8 циклів репродукції нових організмів. Зміна (подвоєння) періоду коливань відбувається за такими величинами коефіцієнта розмноження  $b_1 = 3$  (період – 2);  $b_2 = 3,44949$  (період – 4);

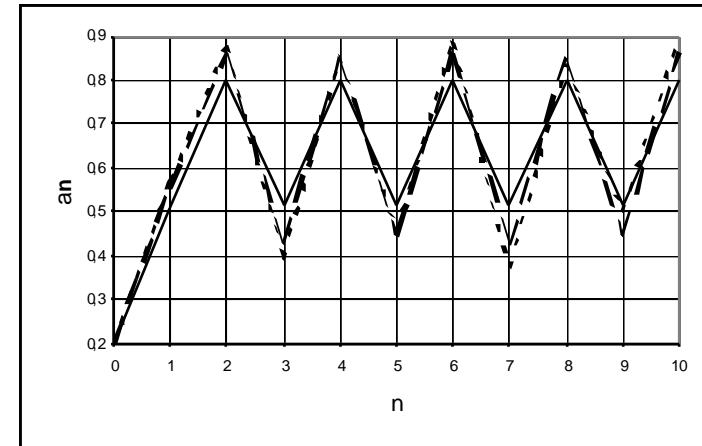


Рис.5 - Зміна розміру популяції у часі, якщо коефіцієнт розмноження знаходиться у межах  $3 < b < 3,5$

$b_3 = 3,54409$  (період – 8). Подвоєння періоду коливань триває з подальшим зростанням коефіцієнта  $b$ , так що відстань між найближчими точками біфуркації стає все меншою:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{b_{m+1} - b_m}{b_m - b_{m-1}} = 4,69196223.$$

Якщо коефіцієнт розмноження впритул наближається до граничної величини  $b = 4$ , то період коливань чисельності популяції стає необмежено великим, вони щільно покривають інтервал можливих значень  $0 < a_n < 1$  і чергуються у послідовності, яку необізнаний спостерігач сприйматиме як послідовність випадкових чисел. Такий режим “хаотичної” зміни будь-якої величини називають **динамічним хаосом**. На рис 6 суцільною лінією позначені коливання розміру популяції за умовами:  $a_0 = 0,2$ ;  $b = 3,95$ . Штрихованою лінією показано графік коливань розміру чисельності популяції за величинами параметрів:  $a_0 = 0,201$ ;  $b = 3,95$ .

Порівнянням графіків на рис.3.6 можна прийти до

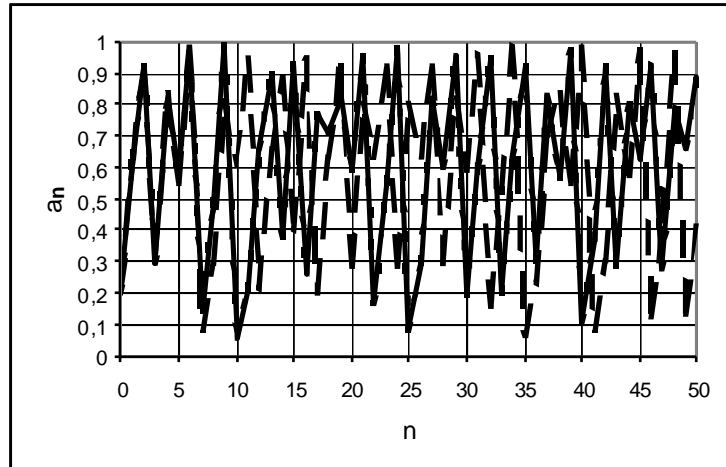


Рис. 6 - Коливання розміру популяції  
у режимі динамічного хаосу

висновку, що прогнозування чисельності популяції у режимі динамічного хаосу на тривалий період часу не є можливим через надзвичайну чутливість прогнозу до точності, з якою визначаються параметри процесу  $a_0$  і  $b$ .

#### Контрольні запитання до підрозділу 3.6.

- 1) Чому величини коефіцієнта розмноження  $b_1, b_2, b_3$  можна назвати точками біфуркації?
- 2) Чи можна назвати точкою біфуркації величину  $b = 1$ ?
- 3) Який стан системи називають динамічним хаосом?
- 4) Чому неможливо надавати тривалого прогнозу стану динамічної системи, якщо вона перебуває у стані, що близький до динамічного хаосу?

#### Контрольні завдання до підрозділу 3.6.

- 1) Знайдіть стаціонарне рішення рівняння (3.60), що відрізняється від рішення (3.62).
- 2) Спробуйте скласти в Excel® програму розрахунку зміни у часі чисельності популяції, що визначається залежністю (3.60), а також провести розрахунки за даними робочого прикладу 3.4 і надати графічного відображення процесам.

Раніше не було ні матриць, ні підсилювачів, а дракони час від часу з'являлись. Просто випадково.  
Станіслав Лем "Сім подорожей Трурля і Клапауція"

## 4. ЙМОВІРНОСНІ МОДЕЛІ СИСТЕМ ДОВКІЛЛЯ

### 4.1. Види ймовірносних моделей

Випадковість постійно виявляється у спостереженнях процесів, що відбуваються в системах навколишнього середовища. Її джерелами можуть бути внутрішні властивості систем, як у випадку з динамічним хаосом, так і обмежена можливість контролювати змінні, що визначають стан системи або її взаємодію з довкіллям. Детерміновані моделі доцільні тоді, коли проявами випадковості можна знехтувати зважаючи на мету моделювання. Навпаки, коли випадковість є суттєвим фактором, доцільним інструментом моделювання систем є ймовірносні моделі, що спираються на поняття ймовірності випадкової події. Серед різноманіття ймовірносних моделей, що знайшли застосування у практиці моделювання систем навколишнього середовища, можна розрізняти статистичні моделі, моделі Монте-Карло і моделі Маркова.

Параметрами **статистичних моделей** є **статистики**, тобто параметри системи, побудовані безпосередньо за даними спостережень. **Моделі Монте-Карло** застосовують для обчислювання розподілів ймовірностей виходів детермінованої системи за відомими розподілами ймовірностей її входів із залученням послідовностей випадкових чисел, що утворюються спеціальними генераторами випадкових чисел. **Моделі Маркова** залучають для моделювання випадкових процесів у системі навколишнього середовища з урахуванням ймовірностей її переходів у різні стани.

Зважаючи на те, що статистичні моделі є мабуть найпоширенішими з ймовірносних моделей, доцільно розглянути їх дещо детальніше.

#### Контрольні запитання до підрозділу 4.1.

- 1) Чим принципово відрізняються ймовірносні моделі

від детермінованих?

- 2) Які види ймовірносних моделей існують?
- 3) Що називають статистиками?
- 4) Як для моделювання утворюють випадкові числа?

#### 4.2. Основні риси статистичних моделей

У широкому розумінні статистичний підхід має давати відповідь на запитання:

1) Чи є детерміновані зв'язки, які називають **трендами**, між величинами за даними їх спостережень, що складають **вибірку**?

2) Яка структура цих зв'язків (трендів), а саме: що, від чого і яким чином залежить?

3) Як найліпше визначити параметри ідентифікованих залежностей, щоб відокремити тренди від прояву випадкових факторів, який називають **шумом**?

3) Які характеристики має шум, що впливають на точність визначення параметрів і надання прогнозів?

Процедури, що застосовуються у пошуку відповіді на перші два запитання, складають етап **ідентифікації статистичної моделі**. Пошук відповіді на останні два запитання складається з процедур етапу **настроїки статистичної моделі**.

Слід зазначити, що не кожні дані спостережень дають вибірки, що пристосовані для використання статистичного метода. Існують спеціальні рекомендації стосовно методів планування і проведення спостережень, що забезпечують бажану якість отриманих даних. Ці методи складають зміст **вибіркового метода досліджень** і мають розглядатися в дисципліні “Моніторинг навколишнього середовища”. Надалі будемо вважати, що маємо дані спостережень у вигляді якісних (репрезентативних) вибірок.

Певною обмеженістю статистичного аналізу даних є те, що досить часто важко передбачити, яку саме форму має залежність між величинами (тренд), тому пошук доводиться проводити методом **спроб і помилок**. Згідно цьому методу пошук трендів виконують ітеративно, а саме: по черзі формулюють різні гіпотези (випробування) щодо можливого виду тренда і перевіряють їх статистичну значимість за певним критерієм (**критерій селекції**).

Гіпотезу відкидають як помилкову, якщо критерій не задовільнено, і приймають у протилежному випадку. Але це не гарантує, що достовірне рішення буде прийняте, тому що треба мати на увазі можливість (ризик) помилок двох родів. **Ризик помилки першого роду** є ймовірність відкинути гіпотезу у випадку, якщо вона насправді є правильною, а **ризик помилки другого роду** є ймовірність прийняти гіпотезу у разі, коли вона є помилковою.

Безпосередній розгляд даних спостережень дозволяє виявити певні залежності лише при досить малих розмірах вибірки. Справа у тому, що числа є лише символами кількісних співвідношень між змінними і значно гірше сприймаються свідомістю ніж образи. Тому продуктивним засобом пошуку залежностей, що можуть бути сховані у даних, є візуалізація даних.

#### Контрольні запитання до підрозділу 4.2.

- 1) Які питання розглядають у статистичному підході?
- 2) Що складає зміст етапу ідентифікації статистичної моделі?
- 3) Що складає зміст етапу настроїки статистичної моделі?
- 4) Для чого використовують метод випробувань і помилок?
- 5) Що називають ризиками першого і другого родів?

#### 4.3. Візуалізація даних спостережень

Взагалі, **візуалізація даних**, тобто надання вибіркам даних певних графічних образів, є дуже поширеним засобом їх відображення. Це стосується не тільки даних спостережень, а також даних, що є результатами моделювання процесів або систем довкілля. Якщо між двома фізичними величинами  $x$  і  $y$  існує певний зв'язок

$$y = f(x) + e, \quad (4.1)$$

де  $f(x)$  є тренд а  $e$  - випадкова складова (шум), то графічне відображення точками у декартовій системі координат



ХОУ результатів вимірів цих величин має виявити певну упорядкованість розташування точок. Навпаки, відсутність тренда має проявлятися у хаотичному розташуванні точок.

#### Робочий приклад 4.1.

Припустимо, що отримані дані щодо коливання розміру (чисельності) популяції організмів на протязі двадцяти років (табл. 1)

Таблиця 1 - Розмір популяції за роками спостережень  
(в частках від максимального розміру)

Номер року	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Розмір популяції	0,49	0,93	0,19	0,66	0,98	0,27	0,85	0,64	1	0,03
Номер року	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Розмір популяції	0,42	0,98	0,33	0,8	0,54	0,9	0,28	0,85	0,6	0,88

Треба з'ясувати, чи є певна залежність чисельності популяції від року спостереження, тобто чи є часовий тренд зміни чисельності популяції. Для цього спочатку будемо точковий графік чисельності популяції в залежності від порядкового номера року (рис. 7).

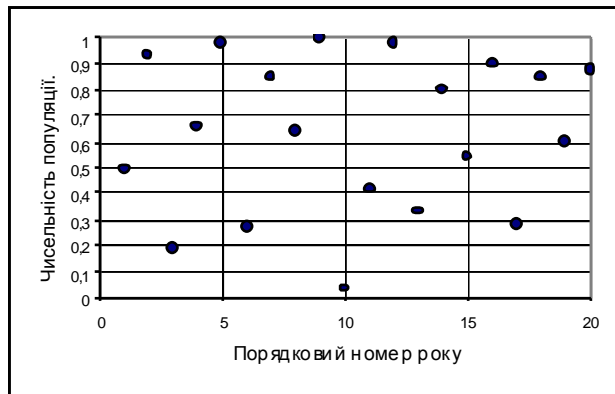


Рис. 7 - Графік (точковий) даних спостережень в координатах "Порядковий номер року" – "Чисельність популяції"

З графіка вбачається, що чисельність популяції досить хаотично розподіляється з роками, не виявляючи певної зміни з часом, що свідчить про відсутність часового тренду. Тому залежність (4.1) чисельності популяції  $a_m$  від порядкового номера року спостережень  $m$  набуває вигляду

$$a_m = \theta + e_m, \quad (4.2)$$

де  $\theta$  є певний сталий розмір популяції, а  $e_n$  є відхилення від сталого розміру популяції у поточному році  $n$  через вплив невідомих випадкових факторів.

Наявність або відсутність певної залежності перевіряється через розрахунок коефіцієнта кореляції величин  $y$  і  $f(x)$ .

#### Контрольні запитання до підрозділу 4.3.

- 1) Що називають візуалізацією даних спостережень?
- 2) Чому кажуть, що краще один раз побачити ніж сто разів почути?
- 3) Що називають декартовою системою координат?

#### 4.4. Коефіцієнт кореляції

Взагалі, коли виникає питання щодо наявності певної залежності між двома фізичними величинами  $X$  і  $Y$ , які визначені вибірками даних спостережень  $x_1, x_2, \dots, x_n$  і  $y_1, y_2, \dots, y_n$ , розраховують вибірковий коефіцієнт кореляції  $K_{x,y}$  за формулами

$$K_{x,y} = \frac{1}{(n-1)S_x S_y} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}); \quad (4.3)$$

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i; \quad (4.4)$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i; \quad (4.5)$$

$$S_x = \sqrt{D_x} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}; \quad (4.6)$$

$$S_y = \sqrt{D_y} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}; \quad (4.7)$$

де  $\bar{x}$  називають вибіркоvim середнім вимірювань величини  $X$ ;  $\bar{y}$  є вибіркoве середнє вимірювань величини  $Y$ ;  $D_x$  є вибіркoва дисперсія вимірювань величини  $X$ ;  $D_y$  є вибіркoва дисперсія вимірювань величини  $Y$ ;  $S_x$  є вибіркoве стандартне відхилення вимірювань величини  $X$ ;  $S_y$  є вибіркoве стандартне відхилення вимірювань величини  $Y$ ;  $n$  є розмір вибірки.

Вибірковий коефіцієнт кореляції завжди має величину у межах  $-1 \leq K_{x,y} \leq 1$ . Якщо розрахункова величина  $K_{x,y}$  задовільняє умові

$$|K_{x,y}| \geq \frac{2}{\sqrt{n-3}}, \quad (4.8)$$

то вважають, що вибірки даних спостережень виявляють статистичну залежність величин  $X$  і  $Y$ . У протилежному випадку, вважається, що вибірки даних не виявляють статистичну залежність величин.

#### Робочий приклад 4.2.

За даними таблиці 1 розрахуємо величину коефіцієнта кореляції розміру вибірки  $a_m$  і порядкового номера року спостереження  $m$ . Відповідно до формул (4.4) – (4.7) і (4.3) отримаємо:

$$\bar{m}=10,5; \quad \bar{a}=0,631; \quad D_m=35,00; \quad D_a=0,08960; \quad S_m=5,916; \\ S_a=0,2993; \quad K_{m,a}=0,1002$$

Перевіряємо виконання умови (4.8):

$$|K_{m,a}| = 0,1002 < \frac{2}{\sqrt{n-3}} = \frac{2}{\sqrt{20-3}} = 0,485.$$

Умова (4.48) не виконується, тому приймаємо рішення щодо відсутності статистичної залежності чисельності популяції від номера року спостереження.

#### Контрольні запитання до підрозділу 4.4.

- 1) Як розраховують вибіркoве середнє даних вимірювань?
- 2) Як розраховують вибіркoву дисперсію даних вимірювань?
- 3) Як розраховують вибіркoве стандартне відхилення?
- 4) Як розраховують вибіркoвий коефіцієнт кореляції?
- 5) Для чого розраховують вибіркoвий коефіцієнт кореляції?

#### 4.5. Лінійна регресійна модель $y = \theta + e$

Відсутність певної залежності фізичної величини  $y$  від величини  $x$ , як, наприклад, це було визначено для чисельності популяції і порядкового номера року спостереження у робочому прикладі 4.2, приводить до висновку, що фізична величина  $y$  має певне стале значення  $\theta$ , а відхилення  $e$  її вимірів від сталої величини викликані впливом випадкових факторів. У цьому випадку розглядають найпростішу лінійну за величиною  $\theta$  модель статистичної залежності (регресії) величини  $y$ , що має вигляд

$$y = \theta + e. \quad (4.9)$$

Настройка моделі (4.9) полягає у визначенні величини  $\theta$ , яку називають *параметром регресії*, і характеристик шуму  $e$ .

Для настройки моделі застосовують *метод найменших квадратів* (МНК), згідно з яким параметр регресії  $\theta$  має бути обраний таким, щоб сума квадратів залишків регресії (залишкова сума квадратів – ЗСК)

$$C\tilde{N}\hat{E}(\hat{\theta}) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta})^2 = \min. \quad (4.10)$$

була мінімальною. У формулі (4.10)  $e_i = y_i - \hat{\theta}$  є залишок

регресії для вимірювання величини  $y$  з порядковим номером  $i$ ;

$\hat{\theta}$  - величина (оцінка) параметра регресії, що обирається. Оцінку  $\hat{\theta}$  параметра регресії знаходять з умови

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\theta}} \zeta \tilde{N}\hat{E}(\hat{\theta}) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}) = -2 \left( \sum_{i=1}^n y_n - n\hat{\theta} \right) = 0, \quad (4.11)$$

що дає рівняння для розрахунку величини  $\hat{\theta}$ :

$$\hat{\theta} = \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_n. \quad (4.12)$$

Крім того, маємо рівняння для розрахунку величин залишків регресії

$$e_i = y_i - \hat{\theta} = y_i - \bar{y}, \quad (4.13)$$

а також залишкової суми квадратів через вибірковою дисперсією або вибірконе стандартне відхилення (4.7) вимірювань величини  $y$ :

$$\zeta \tilde{N}\hat{E}(\hat{\theta}) = (n-1)D_y = (n-1)S_y^2. \quad (4.14)$$

Вибіркова дисперсія і вибірконе стандартне відхилення вимірювань величини  $y$  є також вибірковою дисперсією і вибірконе стандартним відхиленням залишків регресії

$$D_e = D_y, \quad S_e = S_y, \quad (4.15)$$

що є статистичними характеристиками шуму.

Оцінку  $\hat{\theta}$  величини параметра регресії  $\theta$  знаходимо за формулою (4.12) через вимірювання величини  $y$ , що містять

вплив випадкових факторів. Тому величина  $\hat{\theta}$  теж є випадковою і буде відрізнятися від дійсної величини  $\theta$  параметру регресії.

Величину можливих відхилень  $\theta$  показують за допомогою довірчого інтервалу. Для цього спочатку обирають ризик помилки першого роду  $\alpha$  (найчастіше  $\alpha = 0,05$ ), потім за статистичними таблицями або через відповідну функцію в Excel®

знаходять величину  $t_{\nu, \alpha/2}$  зворотнього розподілу Стюдента, що відповідає ймовірності  $\alpha/2$  і числу степенів свободи

$$\nu = n - 1.$$

Довірчий інтервал для параметра регресії  $\theta$  визначається так

$$\hat{\theta} - \frac{S_e}{\sqrt{n}} t_{n-1; \alpha/2} < \theta < \hat{\theta} + \frac{S_e}{\sqrt{n}} t_{n-1; \alpha/2}. \quad (4.16)$$

#### Робочий приклад 4.3.

За даними робочого прикладу 4.2 визначимо параметр регресії для моделі (4.2).

Згідно з розрахунками робочого прикладу 4.2 маємо:

$$\hat{\theta} = \bar{a} = 0,631; \quad S_e = S_a = 0,2993; \quad n = 20.$$

Для визначення довірчого інтервалу обираємо ризик помилки першого роду  $\alpha = 0,05$ . Знаходимо величину  $t_{19; 0,025} = 2,093$ .

Довірчий інтервал для параметра регресії  $\theta$  отримаємо у вигляді  $0,491 < \theta < 0,771$ .

#### Контрольні запитання до підрозділу 4.5.

- 1) Який математичний вигляд має найпростіша статистична модель?
- 2) Коли застосовується найпростіша лінійна регресійна модель?
- 3) Як розраховують оцінку  $\hat{\theta}$  величини параметра регресії?
- 4) Що є статистичною характеристикою шуму?
- 5) Як визначають довірчий інтервал параметра регресії найпростішої регресійної моделі?
- 6) Як залежить величина довірчого інтервалу (4.16) від розміру вибірки?

#### Контрольні завдання до підрозділу 4.5.

- 1) Виконайте розрахунок величини  $\bar{a}$  за даними табл. 1.
- 2) Виконайте розрахунок величини  $S_e$  за даними табл. 1.
- 3) Отримайте величину  $t_{0,05;19}$  користуючись Excel®.

#### Робочий приклад 4.4.

Можна здогадуватись, що чисельність популяції у

наступному році може бути залежною від її чисельності у попередньому році. Тому спробуємо знайти тренд у вигляді

$$a_{m+1} = f(a_m). \quad (4.17)$$

Для цього спочатку побудуємо графік даних вимірювання чисельності популяції з табл. 1 в декартових координатах  $a_m$  -  $a_{m+1}$ . Цей графік зображено на рис. 8.

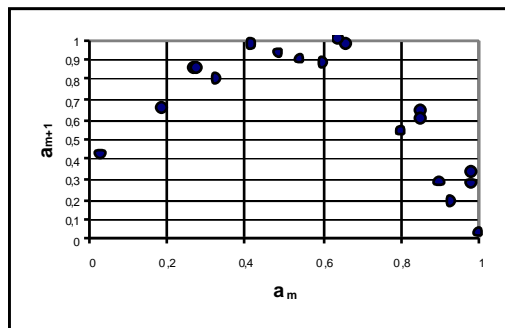


Рис. 8 - Графік даних спостережень в координатах  $a_m$  -  $a_{m+1}$

Розташування точок на графіку вже не є хаотичним, а виявляє квадратичну залежність, що може бути наближена параболою  $a_{m+1} = \lambda z_{m+1} = \lambda a_m (1 - a_m)$  з поки не визначеним коефіцієнтом  $\lambda$ . Це припущення підтверджує графік даних вимірів в координатах  $z_{m+1}$  -  $a_{m+1}$  на рис. 9.

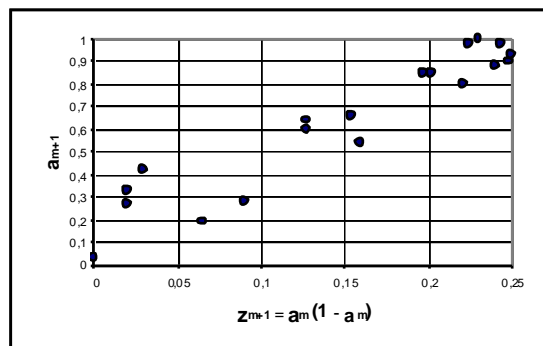


Рис. 9 - Графік даних спостережень в координатах  $z_{m+1}$  -  $a_{m+1}$

Крім того, розрахунок вибіркового коефіцієнта  $K_{z,a}$  кореляції величин  $a_{m+1}$  і  $z_{m+1}$  дає величину  $K_{z,a} = 0,9789$ , що значно перевищує критичний рівень  $2/\sqrt{n-3} = 2/\sqrt{19-3} = 0,5$ . Це дозволяє стверджувати, що між величинами  $a_{m+1}$  і  $z_{m+1}$  існує статистична залежність.

#### 4.6. Лінійна регресійна модель $y = \theta x + e$

У випадку, коли очікується лінійна залежність  $y = \theta x$  величини  $y$  від величини  $x$ , розглядають лінійну модель регресії величини  $y$ , що має вигляд

$$y = \theta x + e. \quad (4.18)$$

Настройка моделі (4.9) полягає у визначенні величини параметра регресії  $\theta$  і характеристик шуму  $e$ . Для настройки моделі також застосовують метод найменших квадратів, згідно з яким параметр регресії  $\theta$  має бути обраний таким, щоб сума квадратів залишків регресії (залишкова сума квадратів – ЗСК)

$$\zeta \tilde{N} \hat{E}(\hat{\theta}) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta} x_i)^2 = \min. \quad (4.19)$$

була мінімальною. У формулі (4.19)  $e_i = y_i - \hat{\theta} x_i$  є залишок регресії для вимірювання величини  $y$  з порядковим номером  $i$ ;  $\hat{\theta}$  - величина (оцінка) параметра регресії, що обирається. Оцінку  $\hat{\theta}$  параметра регресії знаходять з умови

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\theta}} \zeta \tilde{N} \hat{E}(\hat{\theta}) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta} x_i) x_i = 0, \quad (4.20)$$

що дає рівняння для розрахунку величини  $\hat{\theta}$ :

$$\hat{\theta} = \frac{\sum_i x_i y_i}{\sum_i x_i^2}. \quad (4.21)$$

Крім того, маємо співвідношення для розрахунку величин залишків регресії

$$e_i = y_i - \hat{\theta} x_i, \quad (4.22)$$

а також для залишкової суми квадратів через вибірккову дисперсію або вибірккове стандартне відхилення залишків регресії:

$$\zeta \tilde{N} \hat{E}(\hat{\theta}) = (n-1)D_e = (n-1)S_e^2. \quad (4.23)$$

Вибіркова дисперсія  $D_e$  і вибірккове стандартне відхилення  $S_e$  залишків регресії є статистичними характеристиками шуму.

Оцінка  $\hat{\theta}$  параметра регресії теж є випадковою і буде відрізнятися від дійсної величини  $\theta$  параметру регресії. Величину можливих відхилень  $\theta$  також показують через довірчий інтервал. Для цього спочатку обирають ризик помилки першого роду  $\alpha$  (найчастіше  $\alpha = 0,05$ ), потім за статистичними таблицями або через відповідну функцію в Excel<sup>®</sup> знаходять величину  $t_{\nu, \alpha/2}$  оберненого розподілу Стюдента, що відповідає ймовірності  $\alpha/2$  і числу степенів свободи  $\nu = n - 1$ .

Довірчий інтервал для параметра регресії  $\theta$  визначається так

$$\hat{\theta} - \frac{S_e}{\sqrt{\sum_i x_i^2}} t_{n-1; \alpha/2} < \theta < \hat{\theta} + \frac{S_e}{\sqrt{\sum_i x_i^2}} t_{n-1; \alpha/2}. \quad (4.24)$$

#### Робочий приклад 4.5.

Визначимо за даними спостережень параметр  $\lambda$  залежності  $a_{m+1} = \lambda z_{m+1}$ , де  $z_{m+1} = a_m (1 - a_m)$ , що наведена в робочому прикладі 4.4. Послідовно визначаємо з розрахунків

$$\hat{\lambda} = 4,009; S_e = 0,02977; \sqrt{\sum_{m=1}^{19} z_{m+1}^2} = 0,7541; t_{18; 0,025} = 2,101$$

і отримуємо довірчий інтервал (4.24) для параметра регресії  $\lambda$  у вигляді

$$3,93 < \lambda < 4,09.$$

#### Контрольні завдання до підрозділу 4.6.

А) Перевірте правильність розрахунків у робочому прикладі 4.5:

- 1) величини  $\hat{\lambda}$ ;
- 2) величини  $S_e$ ;
- 3) величини  $\sqrt{\sum_{m=1}^{19} z_{m+1}^2}$ ;
- 4) величини  $t_{18; 0,025}$ .

Б) Надайте аргументи на користь того, що оцінка (4.21) дійсно забезпечує мінімальну величину залишкової суми квадратів (4.19).

#### 4.7. Лінійна регресійна модель $y = \theta_0 + \theta_1 x + e$

У випадку, коли очікується лінійна залежність  $y = \theta_0 + \theta_1 x$  величини  $y$  від величини  $x$ , розглядають лінійну модель регресії, що має вигляд

$$y = \theta_0 + \theta_1 x + e. \quad (4.25)$$

Визначення оцінок  $\hat{\theta}_0$ ,  $\hat{\theta}_1$  параметрів регресії  $\theta_0$ ,  $\theta_1$  виконується методом найменших квадратів:

$$\zeta \tilde{N} \hat{E}(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i)^2 = \min. \quad (4.26)$$

У формулі (4.26)  $e_i = y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i$  є залишок регресії для вимірювання величини  $y$  з порядковим номером  $i$ . Оцінки параметрів регресії знаходять з системи двох рівнянь

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\theta}_0} \zeta \tilde{N} \hat{E}(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) = 0, \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\theta}_1} \zeta \tilde{N} \hat{E}(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) x_i = 0. \quad (4.28)$$

З системи рівнянь (4.27), (4.28) отримують формули для розрахунку оцінок параметрів регресії:

$$\hat{\theta}_0 = \bar{y} - \hat{\theta}_1 \bar{x}; \quad (4.29)$$

$$\hat{\theta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad (4.30)$$

де  $\bar{x}$  і  $\bar{y}$  є вибірковими середніми вимірювань.

Як і раніше, дійсні величини  $\theta_0$ ,  $\theta_1$  регресійних параметрів не збігаються з їх випадковими оцінками  $\hat{\theta}_0$ ,  $\hat{\theta}_1$ . Тому для завершення регресійного аналізу треба указати в декартовій системі координат  $(\theta_0, \theta_1)$  *довірчу область*, де можуть бути розташовані дійсні величини регресійних параметрів з довірчою ймовірністю  $P=1-\alpha$ . Ця область в координатах  $(\theta_0, \theta_1)$  обмежена еліпсом, який визначається рівнянням

$$n(\theta_0 - \hat{\theta}_0)^2 + 2\left(\sum_i x_i\right)(\theta_0 - \hat{\theta}_0)(\theta_1 - \hat{\theta}_1) + \left(\sum_i x_i^2\right)(\theta_1 - \hat{\theta}_1)^2 = 2S_e^2 F_{2;n-2;\alpha} \quad (4.31)$$

де  $F_{2;n-2;\alpha}$  є величина  $F$  статистики с  $V_1 = 2$  і  $V_2 = n-2$  степенями свободи, що знаходять в статистичних таблицях або за відповідною функцією в Excel®.

Довірчий інтервал для величини  $\hat{y}$ , що слід очікувати, якщо незалежна змінна прийме довільну величину  $x = \hat{x}$ , визначається за формулою:

$$\hat{y} = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 \hat{x} \pm t_{n-1;\alpha/2} S_e \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(\hat{x} - \bar{x})^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}}. \quad (4.32)$$

Крім того, довірчий інтервал для величини  $y$ , що вона може прийняти, якщо незалежна змінна прийме довільну величину  $x = \hat{x}$ , визначається за формулою:

$$y = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 \hat{x} \pm t_{n-1;\alpha/2} S_e \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(\hat{x} - \bar{x})^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}}. \quad (4.33)$$

У формулах (4.32) і (4.33) знак “+” перед  $t$  статистикою вибирається для верхньої границі довірчого інтервалу, а знак “-” – для його нижньої границі.

#### Робочий приклад 4.6.

За даними вимірів зросту  $y_i$  і ваги  $x_i$  кожної особи з довільної вибірки 20 студентів, що наведені у таблиці 2, спробуємо визначити залежність між цими величинами

Таблиця 2 - Вага і зріст вибірки студентів

$i$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$x_i$ , кг	52	58	61	53	65	52	68	54	62	54
$y_i$ , см	155	156	157	157	158	160	161	163	163	164
$i$	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
$x_i$ , кг	70	67	83	68	70	83	76	95	82	94
$y_i$ , см	167	170	175	175	177	182	184	185	188	189

Як це прийнято, регресійний аналіз починаємо з побудови графіку (рис. 9) розподілу результатів вимірів на площині  $(x; y)$ . З рис. 9 видно, що точки даних вимірювань утворюють розтягнуту “хмарку” з нахилом до осі абсцис. Тому можна сподіватися, що між фізичними величинами існує регресійна залежність. Кореляційний аналіз, тобто розрахунок коефіцієнта кореляції та порівняння його величини з критичною величиною:

$$K_{x,y} = 0,8802 > \frac{2}{\sqrt{n-3}} = 0,4851;$$

зміцнює ці сподівання.

За формулою (4.30) розраховуємо оцінку  $\hat{\theta}_1$  величини

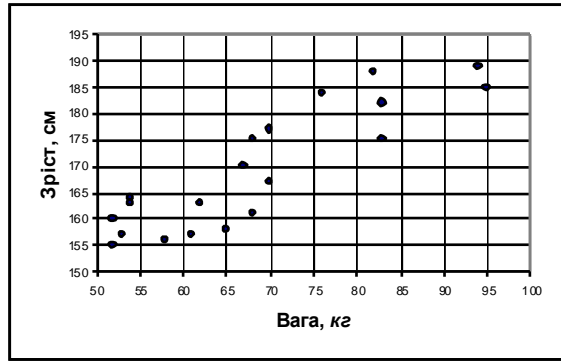


Рис.10 - Графік розподілу даних вимірювань з табл. 2

регресійного параметра  $\theta_1$ :

$$\hat{\theta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \frac{2616,9}{3444,6} = 0,7597 \frac{\tilde{n}\tilde{t}}{\hat{e}\tilde{a}}.$$

Далі розраховуємо оцінку величини іншого регресійного параметра:

$$\hat{\theta}_0 = \bar{y} - \hat{\theta}_1 \bar{x} = 169,3 - 0,7597 \cdot 68,35 = 117,4 \tilde{n}\tilde{t}.$$

Розраховуючи параметри еліпсу (4.31):

$$n = 20; \quad 2\sum_i x_i = 2734 \text{ кг}; \quad \sum_i x_i^2 = 96870 \text{ кг}^2;$$

$$S_e^2 = 30,43 \text{ см}^2; \quad F_{2;18;0,05} = 3,555;$$

визначаємо довірчу область, де з ймовірністю 0,95 можуть знаходитися дійсні величини регресійних параметрів:

$$20(\theta_0 - 117,4)^2 + 2734(\theta_0 - 117,4)(\theta_1 - 0,7597) + 96870(\theta_1 - 0,7597)^2 \leq 216,4 \tilde{n}\tilde{t}^2.$$

Формули (4.32), (4.33) пристосовуємо для розрахунку границь довірчих інтервалів:

$$\hat{y} = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 \hat{x} \pm t_{n-1;\alpha/2} S_e \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(\hat{x} - \bar{x})^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}} = (4.34)$$

$$= 117,4 + 0,7597 \hat{x} \pm 2,093 \cdot 5,516 \cdot \sqrt{0,05 + \frac{(\hat{x} - 68,35)^2}{3444,6}}$$

$$y = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 \hat{x} \pm t_{n-1;\alpha/2} S_e \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(\hat{x} - \bar{x})^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}} = (4.35)$$

$$= 117,4 + 0,7597 \hat{x} \pm 2,093 \cdot 5,516 \cdot \sqrt{1,05 + \frac{(\hat{x} - 68,35)^2}{3444,6}}$$

Завершити регресійний аналіз доцільно побудовою лінії регресії

$$y(x) = 117,4 + 0,7597 x \quad (4.36)$$

разом з границями довірчих інтервалів (4.35), (4.36).

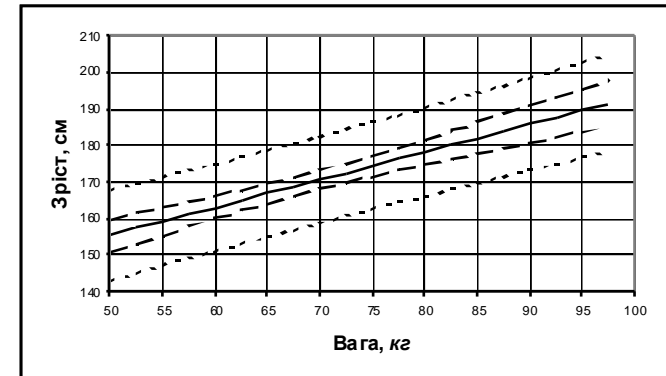


Рис. 11 - Лінія регресії (суцільна) разом з границями довірчих інтервалів (4.34) (штриховані лінії) і (4.35) (пунктирні лінії)

На графіку рис. 10 штрихованими лініями обмежена довірна область, де має проходити лінія регресії за точно

визначеними параметрами регресії. Пунктирні лінії є межами довірчої області, що містить можливі відхилення зросту від величини, яка може бути розрахована за допомогою регресійної моделі по відомій вазі. Так, наприклад, якщо навмання обраний студент має вагу 80 кг, то його зріст, згідно з формулою (4.35), може коливатися у межах від 166 см до 190 см. У той же час середній зріст студентів, що мають таку вагу, згідно з формулою (4.34), знаходиться у межах від 175 см до 182 см. Звичайно, ці оцінки не охоплюють виняткові явища екстремально великих відхилень, що можуть мати місце у випадках ожиріння або дистрофії.

#### Контрольні запитання до підрозділу 4.7.

- 1) Яку розмірність мають параметри регресії у рівнянні (4.25) ?
- 2) Що називають довірчою областю розподілу параметрів регресії?
- 3) Чому рівняння (4.31) є рівнянням еліпсу?
- 4) Що показує довірчий інтервал з границями (4.34)?
- 5) Що показує довірчий інтервал з границями (4.35)?

#### Контрольні завдання до підрозділу 4.7.

- 1) Спробуйте з рівняння (4.27) вивести формулу (4.29).
- 2) Спробуйте з рівнянь (4.27), (4.28) вивести формулу (4.30).
- 3) Переконайтеся, що коефіцієнт кореляції  $K_{x,y}$  розрахований правильно?
- 4) Переконайтеся, що оцінка  $\hat{\theta}_0$  параметра регресії розрахована правильно?
- 5) Переконайтеся, що оцінка  $\hat{\theta}_1$  параметра регресії розрахована правильно?
- 6) Переконайтеся, що розрахункові параметри еліпсу, який є границею довірчої області, визначені правильно.
- 7) Спробуйте самостійно визначити величину  $F_{2;18;0,05}$ .
- 8) Спробуйте самостійно побудувати графік рис. 9 засобами Excel®.
- 9) Спробуйте самостійно побудувати графік рис. 10.

#### 4.8. Модель Монте-Карло процесу очистки стічної води

В підрозділі (3.3) наведена формула (3.40) для сталого режиму роботи біореактора-змішувача, що зв'язує вміст речовини-субстрата на виході реактора  $P_{\hat{a}\hat{e}\hat{o}}$  з її вмістом  $P_{\hat{n}\hat{o}}$  на вході:

$$P_{\hat{a}\hat{e}\hat{o}} = \frac{P_{\hat{n}\hat{o}}}{1 + Bk_2\tau}. \quad (4.37)$$

У той же час зрозуміло, що абсолютно сталий режим роботи очисної споруди не може бути практично реалізованим. У дійсності різні фактори, наприклад, температура, рН, витрата стічної води, вміст забруднюючої речовини на вході біореактора, повільно коливаються навколо певних сталих величин, що викликає відповідні коливання вмісту забруднюючої речовини на виході з біореактора. Модель Монте-Карло дозволяє дослідити статистичні характеристики виходу такої системи, якщо відомі статистичні характеристики її входу.

Для простоти припустимо, що відомі лише межі

$$P_{\min} \leq P_{\hat{n}\hat{o}} \leq P_{\max}; B_{\min} \leq B \leq B_{\max}; \\ k_{\min} \leq k_2 \leq k_{\max}; \tau_{\min} \leq \tau \leq \tau_{\max},$$

в яких відбуваються коливання величин, від яких залежить інтенсивність процесу очистки. Тоді модель Монте-Карло нестационарного процесу очистки стічної води може бути реалізована наступним алгоритмом.

За допомогою генератора випадкових чисел, тобто спеціальної функції, наприклад, з бібліотеки Excel®, розраховують чотири випадкових числа  $P_r$ ,  $B_r$ ,  $k_r$ ,  $\tau_r$ , кожне з яких має рівномірний розподіл в інтервалі зміни відповідної фізичної величини. Далі, за формулою (4.37)

$$p_r = \frac{P_r}{1 + B_r k_r \tau_r} \quad (4.38)$$

розраховують випадкову величину  $p_r$  вмісту забруднюючої речовини на виході. Таку генерацію випадкових чисел і обчислювань вмісту забруднюючої величини на виході з біореактора повторюють досить велику кількість разів (не



менше  $R=1000$ ), отримуючи внаслідок вибірку  $p_1, p_2, \dots, p_R$  величин вмісту забруднюючої речовини на виході з біореактора, що імітують нестационарний процес очистки стічної води. Отриману вибірку аналізують, наприклад, засобами найпростішої моделі регресії (див. підрозділ 4.5). Також корисними методами аналізу отриманих результатів є побудова *емпіричної функції розподілу*  $F(p)$  або *графіка частот розподілу* величини  $p$ . Звичайно, такий алгоритм вимагає проведення багатьох обчислень, тому краще їх робити засобами програмування алгоритму розрахунків.

Для побудови емпіричної функції розподілу  $F(p)$  з вибірки  $p_r$  утворюють *варіаційний ряд*  $\tilde{p}_r$ , тобто ряд, в якому складові вибірки  $p_r$  розташовані у порядку зростання їх величин:  $\tilde{p}_1 \leq \tilde{p}_2 \leq \dots \leq \tilde{p}_R$ . Величина емпіричної функції розподілу  $F(\tilde{p}_r)$ , що відповідає члену варіаційного ряду з порядковим номером  $r$  визначається рівнянням

$$F(\tilde{p}_r) = \frac{r}{R+1}. \quad (4.39)$$

Взагалі, *функція розподілу*  $F(\xi)$  довільної випадкової числової величини  $\xi$  визначає ймовірність  $\Pi = F(a)$ , з якою випадкова величина приймає значення в інтервалі  $\xi \leq a$ .

Для побудови графіка частот розподілу величини  $p$  інтервал  $\Delta P = \tilde{p}_R - \tilde{p}_1$  поділяють на кілька рівних за величиною сегментів  $\Delta p_1, \Delta p_2, \dots, \Delta p_K$  так, щоб на кожний сегмент припадало в середньому не менше 10 членів варіаційного ряду. Для кожного сегмента з порядковим номером  $k$  визначають кількість  $n_k$  членів варіаційного ряду, які за величиною дійсно потрапляють у сегмент  $\Delta p_k$ . Величини частот  $\nu_k = n_k / R$  наводять у вигляді, наприклад, стовбчатої діаграми. Стовбчатую діаграму розподілу частот будь-якої величини за інтервалами її можливих значень також називають *гістограмою*.

#### Робочий приклад 4.7.

Розглянемо систему очисної споруди, що має такі параметри

$$\begin{aligned} 70 \text{ мг/дм}^3 &\leq P_{\text{вх}} \leq 130 \text{ мг/дм}^3; \\ 20000 \text{ мг/дм}^3 &\leq B \leq 40000 \text{ мг/дм}^3; \\ 8 \cdot 10^{-5} \text{ дм}^3/\text{мг} \cdot \text{добу} &\leq k_2 \leq 12 \cdot 10^{-5} \text{ дм}^3/\text{мг} \cdot \text{добу}; \\ 1,8 \text{ доби} &\leq \tau \leq 2,2 \text{ доби}. \end{aligned}$$

За допомогою генератора випадкових чисел *Randbetween* з бібліотеки Excel<sup>®</sup> можна скласти в середовищі Excel<sup>®</sup> просту програму, що реалізує алгоритм моделі Монте-Карло, і провести необхідні розрахунки. При цьому тисяча ітерацій  $R=1000$  забезпечуть достатньо великий розмір вибірки для статистичного аналізу. В результаті визначаються:

- середній вміст забруднюючої речовини на виході з біореактора  $\bar{p} = 15,0 \text{ мг/дм}^3$ ;
- дисперсія вмісту речовини на виході  $D_p = 17,2 \text{ мг}^2/\text{дм}^6$ ;
- стандартне відхилення вмісту речовини на виході  $S_p = 4,15 \text{ мг/дм}^3$ ;
- мінімальний вміст речовини на виході  $p_{\min} = 6,71 \text{ мг/дм}^3$ ;
- максимальний вміст речовини на виході  $p_{\max} = 31,0 \text{ мг/дм}^3$ .

Емпіричний розподіл ймовірностей  $F(p)$  для вмісту  $p$  забруднюючої речовини на виході з біореактора показаний на рис. 11, а діаграма розподілу частот (гістограма) вмісту речовини – на рис. 12. Для побудови гістограми інтервал  $(6,70 \text{ мг/дм}^3; 31,0 \text{ мг/дм}^3)$ , що вміщує вибірку  $p_r$  вмісту забруднюючої речовини, поділено на 27 сегментів шириною  $0,9 \text{ мг/дм}^3$ .

З графіка на рис. 11 можна, наприклад, визначити, що ймовірність виявити на виході з біореактора вміст забруднюючої речовини, який не перевищує величини  $15 \text{ мг/дм}^3$ , дорівнює приблизно 0,55.

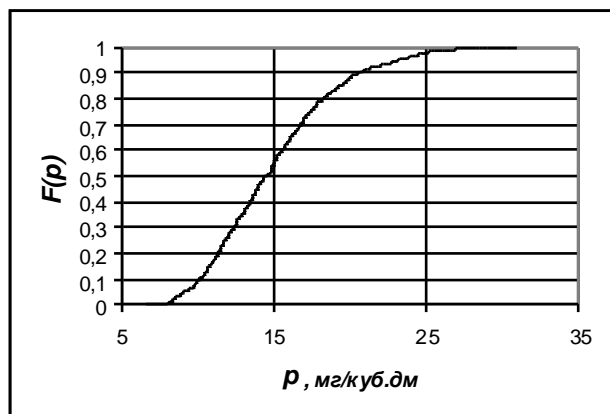


Рис. 12 - Емпірична функція розподілу величини вмісту забруднюючої речовини на виході з біореактора

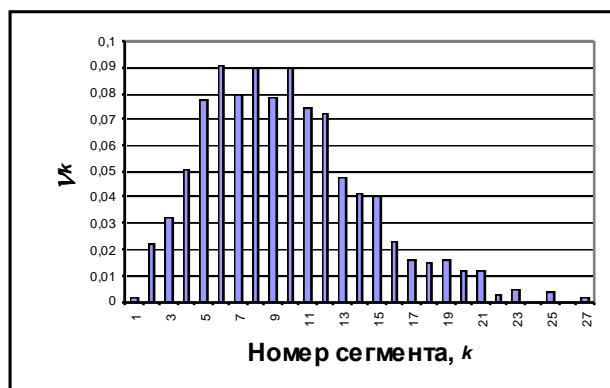


Рис. 13 - Діаграма розподілу частот (гістограма) вмісту забруднюючої речовини на виході з біореактора.

#### Контрольні запитання до підрозділу 4.8.

- 1) З яких операцій складається алгоритм моделі Монте-Карло?
- 2) Що називають варіаційним рядом?
- 3) Як розраховують емпіричну функцію розподілу випадкової величини?
- 4) Що визначає емпірична функція розподілу випадкової величини?
- 5) Що називають гістограмою?

- 6) Як побудувати гістограму розподілу випадкової величини, що задана вибіркою спостережень або результатів розрахунків?
- 7) Схожий чи ні розподіл частот на рис. 12 з нормальним? За якими ознаками?

#### Контрольні завдання до підрозділу 4.8.

- 1) За вихідними даними робочого прикладу 4.7 розрахуйте найменшу можливу величину вмісту забруднюючої речовини на виході.
- 2) За вихідними даними робочого прикладу 4.7 розрахуйте найбільшу можливу величину вмісту забруднюючої речовини на виході.
- 3) Поясніть, чому результати розрахунків за першими двома завданнями не співпадають з відповідними результатами розрахунків за методом Монте-Карло.
- 4) Знайдіть в бібліотеці Excel® функцію *Randbetween* та з'ясуйте її властивості.
- 5) Спробуйте за допомогою функції *Randbetween* розрахувати кілька випадкових чисел в інтервалах, що визначають межі коливань параметрів модельної очисної споруди в робочому прикладі 4.7.
- 6) Спробуйте скласти в середовищі Excel® програму алгоритма Монте-Карло для задачі робочого прикладу 4.7. і виконати розрахунки?
- 7) Якщо розрахунки за завданням 6 проведено, побудуйте графік емпіричної функції розподілу.

#### 4.9. Моделі Маркова динаміки систем довкілля

Моделювання динаміки систем довкілля, що спирається на моделі Маркова, виходить з наближення, в якому система складається з багатьох елементів, що розподілені по певному набору можливих станів  $s_1, s_2, \dots, s_n$ . Цей розподіл має відповідати таким вимогам:

- елемент системи обов'язково знаходиться в одному з станів, що належить набору;
- якщо елемент знаходиться у певному стані, то він не може одночасно перебувати у іншому стані;
- узагальненою характеристикою системи в момент

часу  $t$  є розподіл кількості  $n_i(t)$  елементів системи по станах  $S_i$ , так що повна кількість елементів системи в момент часу  $t$  визначається сумою:

$$\sum_i n_i(t) = N(t); \quad (4.40)$$

• динаміка системи визначається **коефіцієнтами переходу**, а саме: коефіцієнт переходу  $T_{i,j}(\Delta t)$  визначає кількість  $n_{i,j}(t + \Delta t)$  елементів системи, що утворюються у стані  $S_i$  за часовий інтервал  $\Delta t$  з елементів  $n_j(t)$ , що були в стані  $S_j$  на момент часу  $t$ , за формулою:

$$n_{i,j}(t + \Delta t) = T_{i,j}(\Delta t) \cdot n_j(t). \quad (4.41)$$

Загальна кількість  $n_i(t + \Delta t)$  елементів у стані  $S_i$  на момент часу  $t + \Delta t$  розраховується за формулою:

$$n_i(t + \Delta t) = \sum_j T_{i,j}(\Delta t) n_j(t). \quad (4.42)$$

З коефіцієнтів переходу можна утворити **матрицю переходу**, якщо розмістити їх так, щоб коефіцієнт  $T_{i,j}(\Delta t)$  знаходився на перетині строки  $i$  зі стовбцем  $j$ . Матрицю переходу називають **стохастичною матрицею** за виконанням умови

$$\sum_i T_{i,j}(\Delta t) = 1. \quad (4.43)$$

У системах із стохастичною динамікою залишається постійною у часі загальна кількість елементів, тому що

$$\begin{aligned} N(t + \Delta t) &= \sum_i n_i(t + \Delta t) = \sum_i \left( \sum_j T_{i,j}(\Delta t) n_j(t) \right) = \\ &= \sum_j \left( n_j(t) \sum_i T_{i,j}(\Delta t) \right) = \sum_j n_j(t) = N(t). \end{aligned} \quad (4.44)$$

Рівняння (4.41) разом з визначеними величинами коефіцієнтів переходу, часовим інтервалом переходу  $\Delta t$  та

початковим розподілом елементів системи по можливим їх станах  $n_i(t = 0) = n_i(0)$  складають динамічну модель Маркова.

#### Робочий приклад 4.8.

Розглянемо популяцію (систему) організмів (елементи системи), що розрізняються за віком (стани елементів). Позначимо через  $n_1(t)$ ,  $n_2(t)$ ,  $n_3(t)$  кількість організмів першого, другого і третього року розвитку, відповідно. Будемо вважати репродуктивними лише організми другого і третього років розвитку. Кожен організм другого року розвитку народжує за рік в середньому 9, а третього року розвитку – 12 організмів першого року розвитку. Відповідно до цього визначаємо частки  $T_{1,2}(1) = 9$ ,  $T_{1,3}(1) = 12$ . Крім того, третина організмів першого року розвитку за час  $\Delta t = 1$  рік переходить (виживе) на другий рік розвитку, так що  $T_{2,1}(1) = 1/3$ , а з організмів другого року розвитку відповідна половина переходить на третій рік, так що  $T_{3,2}(1) = 1/2$ . Інші переходи для елементів в системі заборонені, тобто:

$$T_{1,1}(1) = T_{2,2}(1) = T_{3,3}(1) = T_{2,3}(1) = T_{1,3}(1) = 0. \quad (4.45)$$

Відповідна матриця переходу має вигляд

$$\hat{T}(\Delta t) = \begin{pmatrix} 0 & 9 & 12 \\ 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

З наведених умов рівняння (4.42) мають вигляд:

$$\begin{aligned} n_1(t + 1) &= 9n_2(t) + 12n_3(t); \\ n_2(t + 1) &= \frac{1}{3}n_1(t); \\ n_3(t + 1) &= \frac{1}{2}n_2(t). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Саме таку модель розвитку самок вивчав М. Х. Уільямсон.

Склавши ці три рівняння, отримаємо рівняння відносно загальної кількості організмів на момент часу  $t$ :

$$N(t+1) = \frac{1}{3}n_1(t) + 9\frac{1}{2}n_2(t) + 12n_3(t). \quad (4.47)$$

З цього рівняння можна побачити, що зміна загальної кількості організмів у часі залежить від розподілу організмів за віком.

Спробуємо з'ясувати, чи існує у популяції сталий розподіл організмів за віком, тобто розподіл, за яким кількість організмів кожного віку змінюється в однакову кількість  $\lambda$  разів через кожний 1 рік

$$n_1(t+1) = \lambda n_1(t); \quad n_2(t+1) = \lambda n_2(t); \quad n_3(t+1) = \lambda n_3(t).$$

За такими умовами рівняння (4.46) набувають вигляду

$$\begin{aligned} -\lambda n_1(t) + 9n_2(t) + 12n_3(t) &= 0; \\ \frac{1}{3}n_1(t) - \lambda n_2(t) &= 0; \\ \frac{1}{2}n_2(t) - \lambda n_3(t) &= 0. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Система рівнянь (4.46) має ненульове рішення тільки тоді, коли її детермінант дорівнює нулю:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 9 & 12 \\ 1/3 & -\lambda & 0 \\ 0 & 1/2 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 + 3\lambda + 2 = -(\lambda - 2)(\lambda + 1)^2 = 0. \quad (4.49)$$

Рівняння (4.49) має невід'ємний корінь  $\lambda = 2$ . За такою величиною  $\lambda$  з рівнянь (4.48) знаходимо

$$n_2(t) = 4n_3(t); \quad n_1(t) = 24n_3(t), \quad (4.50)$$

де  $n_3(t)$  може бути довільним цілим числом. Тоді загальна кількість організмів у системі в момент часу  $t$  є

$$N(t) = n_1(t) + n_2(t) + n_3(t) = 29n_3(t),$$

а кількість організмів в момент часу  $t+1$  рік визначається з рівняння (4.47) як

$$N(t+1) = 58n_3(t) = 2N(t). \quad (4.51)$$

Таким чином, за сталим віковим розподілом організмів на

кожний організм третього року життя знайдеться 4 організма другого року і 24 організм першого року життя. Кількість організмів щорічно удвоюється. Якщо початковий віковий розподіл організмів популяції не є сталим, то популяція наблизиться до сталого розподілу за певну кількість років.

#### Контрольні запитання до підрозділу 4.9.

- 1) Які ознаки моделі Маркова?
- 2) Що визначають коефіцієнти переходу і як саме?
- 3) Що називають матрицею переходу?
- 4) Що називають стохастичною матрицею переходу?
- 5) Як змінюється з часом загальна кількість елементів стохастичної системи?
- 6) Чи є стохастичною матриця переходу з робочого прикладу 4.8?
- 7) Чому не має сенсу розглядати від'ємні корені рівняння (4.49)?

#### Контрольні завдання до підрозділу 4.9.

1) Популяція організмів з робочого прикладу 4.8. має початковий розподіл  $n_1(0)=0$ ,  $n_2(0)=0$ ,  $n_3(0)=1$ . Виконайте розрахунки і визначте розподіл організмів та їх загальну кількість через 5 років.

2) Популяція організмів з робочого прикладу 4.8. має початковий розподіл  $n_1(0)=24$ ,  $n_2(0)=4$ ,  $n_3(0)=1$ . Виконайте розрахунки і визначте розподіл організмів та їх загальну кількість в популяції через 8 років.

По місту завтра очікується  
змінна облачність, вітер  
слабкий до помірного,  
температура повітря від 15  
до 18 градусів Цельсія.

*Прогноз погоди*

## 5. МОДЕЛЮВАННЯ В ПРОГНОЗУВАННІ СТАНУ СИСТЕМ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА

### 5.1. Моделювання в прогнозах і сценаріях стану довкілля

Прогнозування є невідомою складовою свідомої діяльності людей на різних рівнях пізнання явищ довкілля в широкому сенсі, тому що без нього неможлива доцільність вчинків. На побутовому, повсякденному рівні людина постійно аналізує явища, що відбулись, намагається передбачити хід подій у майбутньому і визначити свої дії у відповідності зі своїми інтересами, спираючись на особистий досвід і досвід свого оточення. Звичайно, таке прогнозування не потребує використання математичних або матеріальних моделей. З іншого боку, коли мова йде щодо наукового аналізу функціонування існуючих складних інженерно-технічних або еколого-інженерних систем, оцінки можливих впливів на довкілля дій або об'єктів, що існують тільки в намірах або проектних планах, то моделювання є необхідним інструментом дослідження можливих наслідків і оптимізації втручання в природні процеси довкілля.

Можна розрізнявати два види прогнозів – безумовні та умовні. **Безумовний прогноз** є передбачення і надання або поширення інформації щодо наступу певної події в реальній системі, тобто явища з певними ознаками, що обов'язково наступить у певний проміжок часу і у певному місці. До таких прогнозів відносяться, наприклад, прогнози погоди, що кожного дня надають Гідрометслужби країни, анонси виступів театральних колективів або розклад занять в учбовому закладі. Якість прогнозів характеризують такими первинними показниками як **глибина** (за терміном перспективи, на яку прогноз надається), **детальність** (за складом і кількістю ознак, що прогнозуються), **точність** (за похибками прогнозованих кількісних оцінок) та **виправданість** (за ймовірністю або частотою, з якими прогноз має збігатися або збігається з

реальністю).

На відміну від безумовних прогнозів **умовний прогноз**, який також є передбаченням певних подій або явищ, додатково супроводжується переліком умов, за якими ці події або явища можуть наступити. У зв'язку з відсутністю упевненості, який саме набір факторів, що будуть впливати на хід подій або картину явищ, буде дійсно реалізований, умовні прогнози є багатоваріантними. В умовних прогнозах математичне моделювання є інструментом виконання **прогностичних розрахунків** кількісних ознак можливих явищ, що можуть наступити у відповідності з можливими наборами факторів впливу. Іншими словами, прогностичні розрахунки це є математизований пошук відповідей на запитання якою може бути реакція (вихід) системи навколишнього середовища, якщо складеться певний набір зовнішніх контрольованих і неконтрольованих впливів (входи системи).

Кожний набір входів системи, що розглядається і повністю визначає її реакцію, разом з відповідним розрахованим за моделлю системи її виходом складають **прогностичний варіант** або **сценарій**. Дослідження різних сценаріїв використовується для отримання нових знань про екологічні процеси у системі, визначення умов встановлення її рівноважних станів, прогнозування можливих змін її стану і умов, за якими вони можуть відбутися, а також для оптимізації контрольованих впливів на систему з огляду на потрібні для цього ресурси та бажаність або корисність відповідних режимів її функціонування. Саме вимоги прийняття обґрунтованих рішень щодо управління складними системами навколишнього середовища надають великого практичного значення їх математичним моделям.

### Контрольні запитання до підрозділу 5.1.

- 1) Чим можна пояснити поширеність прогнозів в житті людини і суспільства?
- 2) У чому складається різниця умовних і безумовних прогнозів?
- 3) Які первинними показниками можна характеризувати якість прогнозів?
- 4) Що відносять до прогностичних розрахунків?
- 5) Що називають прогностичним варіантом, сценарієм?

## 5.2. Матриця відгуків системи

Узагальненим результатом математичного моделювання в термінах сценарійного підходу може бути **матриця відгуків** системи, що відображає реакції (стан)  $R_{i,j}$  системи на реалізацію рішення або плану дій в рамках певного варіанту  $B_i$  контрольованих впливів на систему за умовою, якщо наступить варіант  $H_j$  неконтрольованих впливів (табл. 3). Відгук системи  $R_{i,j}$  на впливи є сукупністю показників, що має містити показники, за якими стан системи може бути оцінений в різних аспектах – економічному, соціальному, екологічному.

Таблиця 3 - Матриця відгуків системи

Варіанти контрольованих впливів, $B_i$	Варіанти неконтрольованих впливів, $H_j$			
	$H_1$	$H_2$	...	$H_J$
$B_1$	$R_{1,1}$	$R_{1,2}$	...	$R_{1,J}$
$B_2$	$R_{2,1}$	$R_{2,2}$	...	$R_{2,J}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	
$B_I$	$R_{I,1}$	$R_{I,2}$	...	$R_{I,J}$

Отримані і сгруповані таким чином дані моделювання разом з іншими даними складають інформаційну базу для прийняття рішень щодо доцільного втручання у зміни режимів функціонування (стану) системи навколишнього середовища.

Щоб формалізувати підхід до вибору оптимального рішення, кожному можливому відгуку (стану) системи  $R_{i,j}$  має бути зіставлена величина **функції корисності**  $K(H_{i,j}, B_{i,j}, R_{i,j})$ , що визначає оцінку доцільності стану і є у загальному випадку соціоекономічним критерієм корисності кожного розглядаемого сценарію  $(H_{i,j}, B_{i,j}, R_{i,j})$ , або **функції втрат**  $P(H_{i,j}, B_{i,j}, R_{i,j})$ , що визначає втрати внаслідок реалізації сценарію  $(H_{i,j}, B_{i,j}, R_{i,j})$ .

Огляд різних підходів до пошуку оптимального або доцільного варіанту контрольованих впливів в задачах одноцільової (за одним критерієм) та багатоцільової (за кількома критеріями) оптимізації систем навколишнього середовища є предметом дисципліни “Інформаційні технології управління”. Як приклад застосування одного класичного критеріїв оптимального

вибору рішень в умовах невизначеності неконтрольованих впливів, а саме – критерія мінімакса, розглянемо далі просту модель оптимізації системи інспекційного контролю додержання нормативів ліміту скидів забруднюючих речовин в навколишнє середовище у складі стічних вод водокористувачів.

### Контрольні запитання до підрозділу 5.2.

- 1) Що є відгуком системи на зовнішній вплив з точки зору економіко-екологічного оцінювання?
- 2) Що є елементами матриці відгуку?
- 3) Що визначає функція корисності або втрат?

## 5.3. Ймовірнісна модель вибіркового контролю додержання нормативів ГДС

Розглянемо процедуру контролю неперервного скиду стічної води через випуск у водний об'єкт, на який встановлено нормативи гранично допустимого скиду (ГДС), тобто нормативи на склад і вміст забруднюючих речовин. Контроль складається з відбору проб і перевірки вмісту забруднюючих речовин. Якщо вміст речовин у пробі знаходиться в межах, встановлених нормативами ГДС, то проба є нормальною і скид визнається нормальним на момент часу, коли відбиралася проба. У протилежному випадку проба є дефектною і скид визнається таким, що відбувався з порушенням нормативів ГДС. Ймовірність  $P$  виявити порушення нормативів ГДС залежить від об'єму скиду  $W$  стічної води через випуск за певний часовий інтервал, наприклад, за рік, від об'єму  $W$  стічної води, що скидається з порушенням нормативів ГДС і кількості  $N$  проб, що за цей період часу відбирається на випуску. Якщо відбір проб рандомізовано, то ця залежність визначається біноміальним розподілом ймовірностей

$$P_{N,n} = C_N^n p^n (1-p)^{N-n} = \frac{n!}{N!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n}, (5.1)$$

де  $P_{N,n}$  є ймовірність події, що буде виявлено  $n$  дефектних проб;  $p = w/W$  є ймовірність виявити порушення нормативів ГДС, якщо відібрати лише одну пробу за весь період часу.

Кількість дефектних проб, що можуть бути виявлені за річний період, є величиною випадковою з середнім  $\bar{n} = pN$ , дисперсією  $D_n = Np(1-p)$  і стандартним відхиленням  $S_n = \sqrt{Np(1-p)}$ . Формула (5.1) є ймовірною моделлю контролю скиду стічної води, коли визначена величина порушень нормативів ГДС, тобто величина  $p = w/W$ . Вона дозволяє обчислювати ймовірності різних результатів контролю. Наприклад, ймовірність події, що контроль виявить кількість  $n'$  дефектних проб не більше певної величини  $n' \leq n$ , розраховується за формулою

$$P_{N, n' \leq n} = \sum_{n'=0}^n P_{N, n'} = \sum_{n'=0}^n \frac{n'!}{N!(N-n')!} p^{n'} (1-p)^{N-n'}, \quad (5.2)$$

а ймовірність події, що контроль виявить кількість  $n'$  дефектних проб не менше певної величини  $n' \geq n$ , розраховується за формулою

$$P_{N, n' \geq n} = \sum_{n'=n}^N P_{N, n'} = \sum_{n'=n}^N \frac{n'!}{N!(N-n')!} p^{n'} (1-p)^{N-n'}, \quad (5.3)$$

Проте з практичної точки зору більш цікавою є зворотна задача оцінки величини порушень нормативів скиду, тобто величини об'єму  $w$ , за результатами контролю, а саме за кількістю дефектних проб  $n$ , що були виявлені. Така оцінка має ймовірносний характер і наводиться довірчим інтервалом  $p_H W \leq w \leq p_B W$ , де коефіцієнти  $p_H$  і  $p_B$  визначаються з рівнянь

$$\sum_{n'=n}^N \frac{n'!}{N!(N-n')!} p_H^{n'} (1-p_H)^{N-n'} = \frac{\alpha}{2}; \quad (5.4)$$

$$\sum_{n'=0}^n \frac{n'!}{N!(N-n')!} p_B^{n'} (1-p_B)^{N-n'} = \frac{\alpha}{2}, \quad (5.5)$$

де  $\alpha$  є ризик помилки першого роду.

#### Робочий приклад 5.1.

Розглянемо ситуацію, коли на випуску стічної воду з

річним об'ємом скиду  $10^6 \text{ м}^3$  контроль виявив 3 дефектні проби з 50, що були отобрані на протязі року. Треба оцінити об'єм скиду, що відбувався з порушенням нормативів ГДС. Ризик помилки першого роду  $\alpha = 0,05$ .

Коефіцієнти довірчого ряду знаходимо з рівнянь

$$\sum_{n'=3}^{50} \frac{n'!}{50!(50-n')!} p_H^{n'} (1-p_H)^{50-n'} = 0,025; \quad (5.6)$$

$$\sum_{n'=0}^3 \frac{n'!}{50!(50-n')!} p_B^{n'} (1-p_B)^{50-n'} = 0,025. \quad (5.7)$$

Рішення рівнянь знаходимо методом спроб і помилок:  $p_H = 0,013$ ;  $p_B = 0,165$ . Довірчий інтервал для величини  $w$  є  $13000 \text{ м}^3 \leq w \leq 165000 \text{ м}^3$ .

#### Контрольні завдання до підрозділу 5.3.

- 1) Виконайте розрахунок величини  $P_{50,3}$ .
- 2) За умов робочого прикладу 5.1. знайдіть рішення рівняння (5.6) методом спроб і помилок в середовищі Excel®.
- 3) За умов робочого прикладу 5.1. знайдіть рішення рівняння (5.7) методом спроб і помилок в середовищі Excel®.

#### 5.4. Модель оптимізації системи інспекційного контролю додержання нормативів ГДС

Розглянемо систему інспекційного контролю, що охоплює  $K$  випусків стічної води у водойми з річними об'ємами скиду  $W_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, K$ . Сумарний об'єм скиду стічних вод є  $W = \sum W_k$ . Припустимо, що єдиною метою інспекційного контролю є виявлення порушень нормативів ліміту скидів забруднюючих речовин в навколишнє середовище, якщо вони мають місце внаслідок порушень водокористувачами технологічного режиму використання споживаємої або відведення стічної води. Позначимо через  $w_k$  річний об'єм стічної води, що може скидатися на випуску  $k$  з

порушенням встановлених для нього нормативів скиду. Величина  $w = \sum w_k$  є загальним річним об'ємом стічних вод, що скидається з порушенням нормативів скиду. Якщо інспекційний контроль проводиться знезапечно для водокористувача, то ймовірність виявити порушення нормативу на випуску  $k$  при разовому замірі витрати стічної води і вмісту забруднюючих речовин дорівнює величині  $p_k = w_k / W_k$ , а ймовірність не виявити порушення є  $r_k = 1 - p_k = 1 - w_k / W_k$ . Якщо на протязі року буде здійснено  $N_k$  раптових перевірок дотримання нормативів скиду на випуску  $k$ , то ймовірність не виявити порушень зменшиться до величини  $r_k^{N_k} = (1 - p_k)^{N_k}$ . Ймовірність не виявити порушень нормативів скиду на жодному з контрольованих випусків визначається формулою

$$\hat{P} = \prod_k (1 - p_k)^{N_k}. \quad (5.8)$$

Будемо вважати, що система інспекційного контролю має обмежені ресурси, які дозволяють щорічно провести не більше  $N$  перевірок. Ці перевірки можна розподілити між випусками за різними варіантами так, що  $\sum N_k = N$ . Задача оптимізації полягає у визначенні доцільного розподілу інспекційних перевірок між випусками, який забезпечує найменшу ймовірність  $\hat{P}$  невиявлення порушень нормативів скиду стічних вод, якщо вони є. Натуральний логарифм  $\hat{P}$  є зручною **функцією втрат** системи інспекційного контролю і визначається за формулою

$$\hat{I}(N_k, p_k) = \ln \hat{P} = \sum_k N_k \ln(1 - p_k) \quad (5.9)$$

з обмеженнями

$$\sum_k N_k = N; \quad (5.10)$$

$$\sum_k q_k p_k = P, \quad (5.11)$$

де  $q_k = W_k / W$  є питомий річний об'єм скиду стічної води на

випуску  $k$ ;  $P = w / W$  є ймовірність виявити порушення нормативів скиду за одноразовою перевіркою в наугад обраній частині річного об'єму скиду стічних вод усіх випусків.

У викладеній постановці маємо оцінку якості системи інспекційного контролю у вигляді функції (5.9), що залежить від змінних  $N_k$  контрольованого впливу і змінних  $p_k$  неконтрольованого впливу на втрати системи контролю. Чим більше ймовірність невиявлення порушень нормативів скиду, тим гірше якість системи контролю і більше її втрати. Задача пошуку оптимального розподілу перевірок ускладнюється відсутністю інформації щодо очікуваних величин  $p_k$ , що створює умови невизначеності неконтрольованих впливів.

Але можна передбачити певну поведінку водокористувачів в залежності від частоти інспекційних перевірок, а саме: чим частіше перевіряється додержання нормативів скиду стічних вод на певному випуску, тим більше водокористувач має приділяти увагу їх додержанню, зменшуючи тим самим ймовірність виявлення порушень. Тож доцільно припустити, що за будь-яким розподілом перевірок на випусках відповідна реакція водокористувачів призведе до максимально можливого підвищення величини функції втрат (5.9) системи контролю. Це припущення дозволяє визначити найгірший з огляду на мету інспекційного контролю розподіл величин  $p_k$ , що відповідає обраному розподілу перевірок  $N_k$ , і відповідну величину  $\hat{I}(N_k)$  функції втрат з умови максимуму функції втрат при обмеженні (5.11):

$$\hat{I}(N_k) = \max_{\sum_k q_k p_k = P} \hat{I}(N_k, p_k). \quad (5.12)$$

Рішення задачі на умовний максимум (5.12) знаходиться методом невизначених множників Лагранжа у вигляді

$$p_k = 1 - (1 - P) \frac{N_k}{N q_k}; \quad (5.13)$$

$$\hat{I}(N_k) = \sum_k N_k \ln \left[ (1 - P) \frac{N_k}{N q_k} \right]. \quad (5.14)$$



За визначених умов (5.13) “протидії” цілям інспекційного контролю найліпший розподіл перевірок і відповідну величину функції втрат  $\ddot{I}$  знаходимо з умови мінімуму функції втрат  $\ddot{I}(N_k)$  з обмеженням (5.10):

$$\ddot{I} = \min_{\sum_k N_k = N} \ddot{I}(N_k) = \min_k \max_{\sum_k q_k p_k = P} \ddot{I}(N_k, p_k). \quad (5.15)$$

Рішення задачі на умовний мінімум (5.15) також знаходиться методом невизначених множників Лагранжа у вигляді

$$N_k = N q_k; \quad (5.16)$$

$$\ddot{I} = N \ln(1 - P). \quad (5.17)$$

Вибір за **критерієм мінімакса** (5.15) розподілу (5.16) числа інспекційних перевірок на випусках **пропорційно до питомих об’ємів річного скиду** стічних вод гарантовано забезпечує величину  $\hat{P}$  ймовірності невиявлення порушень нормативів скиду в системі інспекційного контролю на рівні

$$\hat{P} \leq (1 - P)^N \quad (5.18)$$

за будь-яким розподілом (5.11) величини  $P$ .

Оцінка (5.18) величини  $\hat{P}$  дозволяє зробити висновки щодо максимального питомого об’єму  $P = w/W$  річного скиду стічних вод з порушенням нормативів скиду, що не може бути виявленим системою інспекційного контролю з обсягом перевірок  $N$ . Якщо система контролю не виявила жодного порушення нормативів скиду, то  $\hat{P} > \alpha$ , де  $\alpha$  є ризик помилки першого роду. З урахуванням (5.18) це дозволяє стверджувати, що  $(1 - P)^N > \alpha$  а значить  $P < 1 - \sqrt[N]{\alpha}$ . На рис. 13 наведено графік залежності максимальної величини

$$P_{\max} = \frac{w_{\max}}{W} = 1 - \sqrt[N]{\alpha} \quad (5.19)$$

питомого об’єму скиду з порушенням нормативів скиду, що не може бути виявленою системою інспекційного контролю з обсягом перевірок  $N$ .

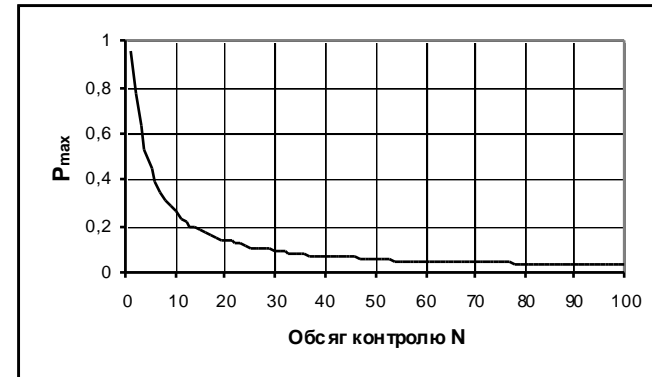


Рис. 14 - Ймовірність невиявлення порушень нормативів скиду ( $\alpha = 0,05$ )

З формули (5.19) також можна визначити потрібний мінімальний розмір вибірки контрольних спостережень, що забезпечує надійне (з ризиком помилки першого роду  $\alpha$ ) виявлення порушень нормативів скиду у разі перевищення певного максимального питомого об’єму  $P_{\max}$  річного ненормативного скиду стічних вод в навколишнє середовище, а саме:

$$N_{\min} = \frac{\ln \alpha}{\ln(1 - P_{\max})}. \quad (5.20)$$

Наведений аналіз і оцінка спроможності системи контролю скидів стічних вод можуть бути корисними також для оптимального планування інших контрольних спостережень, наприклад, за дотриманням встановлених лімітів на приймання стічних вод підприємств і установ до міських каналізаційних систем.

#### Робочий приклад 5.1.

Розглянемо задачу найліпшого розподілу інспекційної вибірки розміром  $N=50$  проб/рік серед 10 випусків стічної води з річними об’ємами скиду, що наведені в табл. 4.

Таблиця 4 - Річні об’єми скиду на випусках (тис. м<sup>3</sup>/рік)

Номер випуску, i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Об’єм скиду	7	860	112	327	17	48	275	11	67	5

Користуючись співвідношенням (5.16) знаходимо оптимальний розподіл інспекційної вибірки, що наведений у табл. 5.

Таблиця 5 - Оптимальний розподіл вибірки 50 проб серед 10 випусків стічної води

Номер випуску, $i$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Число проб за рік	1,90	240 2	3,13	9,13	0,48	1,34	7,68	0,31	1,87	0,14

#### Контрольні запитання до підрозділу 5.4.

- 1) Чому краще за функцію втрат прийняти натуральний логарифм  $\hat{P}$ , а не само  $\hat{P}$ ?
- 2) Чому функцію (5.9) називаємо функцією втрат, а не функцією корисності?
- 3) Чому критерій (5.15) доцільно називати критерієм мінімакса?

#### Контрольні завдання до підрозділу 5.4.

1) Оптимальний розподіл проб серед випусків, що наведений у табл. 5. вміщує дрібні величини. Але проба не може відбиратися дрібними частками. Обмізкуйте та наведіть пропозиції щодо можливостей практичної реалізації оптимального розподілу інспекційної вибірки.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Вавилин В.А., Васильев В.Б. Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод активным илом. – М.: Наука, 1979.
2. Джефферс Дж. Введение в системный анализ: применение в экологии. – М.: Мир, 1981.
3. Караушев А.В. Методические основы оценки и регламентированного влияния на качество поверхностных вод. – Л.: Гидрометеиздат, 1987.
3. Ковальчук П. І. Моделювання і прогнозування стану нівколишнього середовища: Навч. посібник. – К.: Либідь, 2003.
4. Моисеев Н.Н. Математические задачи системного анализа. - М.: Наука, 1981.
5. Одум Ю. Основы экологии. – М.: Мир, 1975.
6. Прокопенко А. И., Вайнер В. Г., Галкин В. Л. Экономико-экологическое моделирование: Учебн. Пособие. – Харьков: АО “Бизнес Информ”, 1997.
7. Пэнгл Р. Методы системного анализа окружающей среды. - М.: Мир, 1979.
8. Berthouex, P. M., Brown, L. C. Statistics for Environmental Engineers. CRC Press LLC, 2002.
9. Nirmala Khandan, N. Modeling Tools for Environmental Engineers and Scientists. CRC Press LLC, 2001.

## ЗМІСТ

Вступ.....	3
------------	---

<b>Розділ 1. Місце математичного моделювання в системному аналізі довкілля</b>	
1.1. Ознаки системи, характеристика та види систем.....	4
1.2. Місце математичного моделювання в системному аналізі довкілля.....	7
1.3. Основні ствиді побудови та види математичних моделей.....	9

<b>Розділ 2. Побудова детермінованих моделей систем навколишнього середовища</b>	
2.1. Кількісні показники вмісту, обміну та трансформації речовин в системах.....	12
2.2. Принцип матеріального балансу.....	14
2.3. Закон діючих мас.....	16
2.4. Стехіометричні обмеження.....	20

<b>Розділ 3. Прості динамічні моделі природних і біоінженерних систем довкілля</b>	
3.1. Непреривна модель динаміки вмісту неконсервативної речовини у водоймі.....	23
3.2. Непреривна модель процесу очистки стічної води у біореакторі-дозаторі.....	24
3.3. Непреривна модель процесу очистки стічної води у біореакторі-змішувачі.....	30
3.4. Непреривна модель процесу очистки стічної води у біореакторі-витискувачі.....	34
3.5. Дискретна модель процесу очистки стічної води у біореакторі-змішувачі.....	37
3.6. Дискретна модель динаміки чисельності популяції організмів.....	41

<b>Розділ 4. Ймовірносні моделі систем довкілля</b>	
4.1. Види ймовірносних моделей.....	45
4.2. Основні риси статистичних моделей.....	46
4.3. Візуалізація даних спостережень.....	47
4.4. Коефіцієнт кореляції.....	49

4.5. Лінійна регресійна модель $y = \theta + e$ .....	51
4.6. Лінійна регресійна модель $y = \theta x + e$ .....	55
4.7. Лінійна регресійна модель $y = \theta_0 + \theta_1 x + e$ .....	57
4.8. Модель Монте-Карло процесу очистки стічної води.....	63
4.9. Моделі Маркова динаміки систем довкілля.....	67

<b>Розділ 5. Моделювання в прогнозуванні стану систем навколишнього середовища</b>	
5.1. Моделювання в прогнозах і сценаріях стану довкілля.....	72
5.2. Матриця відгуків системи.....	74
5.3. Ймовірносна модель вибіркового контролю додержання нормативів ГДС.....	75
5.4. Модель оптимізації системи інспекційного контролю додержання нормативів ГДС.....	77

Список літератури.....	83
------------------------	----

## **НАВЧАЛЬНЕ ВИДАННЯ**

Навчальний посібник до вивчення дисципліни  
“Моделювання і прогнозування стану довкілля” (для  
студентів денної і заочної форм навчання спеціальності  
6.070800 - „Екологія та охорона навколишнього  
середовища” напряму 0708 - „Екологія”).

**Автор:** Валерій Олександрович Бараннік

**Редактор:** М.З. Аляб'єв

**Коректор:** З.І. Зайцева

**Комп'ютерна набір і верстка:** В.О. Бараннік

План 2007, поз. 24 дод.

---

Підп. до друку 3.07. 2007 р. Формат 60х84 1/16 Папір офісний

Друк на ризографі Умовно.-друк.арк. 3,7 Обл.-вид.арк 4,0

---

Замовл. № Тираж 150 прим.

---

61002, Харків, ХНАМГ, вул. Революції, 12

---

Сектор оперативної поліграфії ІОЦ ХНАМГ

---

61002, Харків, вул. Революції, 12

---